



دانشگاه الزهرا(س)

دانشکده علوم پایه

پایان نامه

جهت اخذ کارشناسی ارشد

رشته شیمی - فیزیک

عنوان

بررسی پیوند هیدروژنی درون مولکولی در دی هیدروکسی نفتازارین

استاد راهنما

سرکار خانم دکتر زاهدی

دانشجو

نسیم شاه منصوری

شهریور ۱۳۹۰

"کلیه دستاوردهای ناشی از تحقیق فوق متعلق به دانشگاه الزهراء (س) است"

تقدیم به همه ی کسانی که من را در انجام این تحقیق یاری کردند.

چکیده

بهینه سازی کامل ساختار مولکول دی هیدروکسی نفتازارین توسط نظریه ی تابعی چگالی در سطح نظری B3LYP و با استفاده از مجموعه های پایه 6-31G** و 6-311++G** انجام شد. همچنین محاسبات مربوط به HNMR نیز در همان سطح و با مجموعه پایه 6-311++G**، با استفاده روش GIAO انجام شد. محاسبات و انتساب فرکانس ترکیبات دوتره شده و دوتره نشده نیز در همین سطح محاسباتی انجام شد. در این مطالعه، مقایسه ای بین مجموعه پارامترهای به دست آمده ی دی هیدروکسی نفتازارین و مجموعه پارامترهای مربوط به نفتازارین و هیدروکسی نفتازارین به عمل آمد.

در نهایت، نتایج نشان دادند بسته به اینکه OH کنار گروه C=O باشد یا OH، قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی می تواند تغییر کند.

کلمات کلیدی: دی هیدروکسی نفتازارین، نفتازارین، نظریه ی تابعی چگال، پیوند هیدروژنی درون

مولکولی

:

- ۱-۱) تاریخچه ی پیوند هیدروژنی..... ۱
- ۲-۱) مقدمه ای بر پیوند هیدروژنی..... ۳
- ۳-۱) توصیف پیوند هیدروژنی..... ۵
- ۴-۱) نگاهی به پیوند هیدروژنی از لحاظ تئوری..... ۶
- ۵-۱) انواع پیوند هیدروژنی ۸
- ۶-۱) پیوند هیدروژنی قوی..... ۱۰
- ۷-۱) پیوند هیدروژنی متوسط..... ۱۱
- ۸-۱) پیوند هیدروژنی ضعیف..... ۱۲
- ۹-۱) ویژگی های ارتعاشی..... ۱۲
- ۱۰-۱) انواع توابع پتانسیل پیوندهای هیدروژنی..... ۱۳
- ۱-۱۰-۱) تابع پتانسیل تک کمینه ای نا متقارن..... ۱۴
- ۲-۱۰-۱) تابع پتانسیل دو کمینه ای نا متقارن..... ۱۴
- ۳-۱۰-۱) تابع پتانسیل دو کمینه ای متقارن..... ۱۵
- ۴-۱۰-۱) تابع پتانسیل تک کمینه ای متقارن..... ۱۶
- ۱۱-۱) اثر ایزوتوپی در پیوند هیدروژنی..... ۱۷
- ۱-۱۱-۱) اثرات ایزوتوپی مثبت و منفی..... ۱۸
- ۱۲-۱) روش های مطالعه و بررسی پیوندهای هیدروژنی..... ۱۸
- ۱-۱۲-۱) طیف بینی IR و رامان..... ۲۱

- ۲۳ طیف بینی چرخشی ریز موج (۲-۱۲-۱)
- ۲۳ طیف بینی رزونانس مغناطیسی هسته (۳-۱۲-۱)
- ۲۵ X-Ray و پراش نوترونی (۴-۱۲-۱)
- ۲۷ اندازه گیری های ترموشیمیایی (۵-۱۲-۱)
- ۲۸ شیمی محاسباتی (۶-۱۲-۱)

:

- ۳۱ (۱-۲) نگاهی کلی به شیمی محاسباتی (۱-۲)
- ۳۲ روش های مکانیک مولکولی (۲-۲)
- ۳۴ روش های ساختار الکترونی (۳-۲)
- ۳۴ روش های نیمه تجربی (۴-۲)
- ۳۶ (۱-۴-۲) محدودیت ها و مزایای روش های نیمه تجربی (۱-۴-۲)
- ۳۷ روش های آغازین (۵-۲)
- ۳۸ (۱-۵-۲) روش میدان خود سازگار هارتری (۱-۵-۲)
- ۴۰ (۲-۵-۲) روش میدان خودسازگار هارتری-فاک (۲-۵-۲)
- ۴۱ (۳-۵-۲) روش های هارتری-فاک محدود شده (RHF) و محدود نشده (UHF) (۳-۵-۲)
- ۴۲ (۴-۵-۲) محدودیت ها و مزایای روش های هارتری-فاک (۴-۵-۲)
- ۴۲ (۶-۲) همبستگی الکترونی (۶-۲)
- ۴۳ (۷-۲) روش اختلال مولر-پلست (۷-۲)
- ۴۴ (۸-۲) برهمکنش پیکربندی (۸-۲)
- ۴۵ (۹-۲) روش کلاستر جفت شده (۹-۲)

۴۶ روش های تئوری تابعی چگالی..... (۱۰-۲)
۴۸ توابع پایه..... (۱۱-۲)
۵۰ سری های پایه..... (۱-۱۱-۲)
۵۱ سری های پایه ی ظرفیتی - شکافته..... (۱-۱-۱۱-۲)
۵۲ سری های پایه ی قطبیده..... (۲-۱-۱۱-۲)
۵۳ سری های پایه ی نفوذی..... (۳-۱-۱۱-۲)
 :
۵۶ مروری بر خصوصیات نفتازارین..... (۱-۳)
۶۰ مونو هیدروکسی نفتازارین..... (۲-۳)
۶۱ دی هیدروکسی نفتازارین..... (۳-۳)
 :
۶۶ مقدمه..... (۱-۴)
۶۷ روش های محاسباتی به کار رفته در پژوهش..... (۲-۴)
۶۷ بررسی محاسبات ترکیب ۳و۲- دی هیدروکسی نفتازارین..... (۳-۴)
۷۱ بررسی پارامترهای ساختاری..... (۱-۳-۴)
۷۱ پیوند O1 ... O8-H8..... (۱-۱-۳-۴)
۷۲ پیوند O4...O5-H5..... (۲-۱-۳-۴)
۷۳ بررسی جابجایی شیمیایی در HNMR..... (۲-۳-۴)
۷۴ بررسی طیف ارتعاشی..... (۳-۳-۴)
۷۴ ناحیه $1700-3600\text{ cm}^{-1}$ (۱-۳-۳-۴)

- ۷۵ ناحیه $1000-1700\text{ cm}^{-1}$ (۲-۳-۳-۴)
- ۷۵ ناحیه زیر 1000 cm^{-1} (۳-۳-۳-۴)
- ۸۱ تخمین قدرت پیوند هیدروژنی (تفاوت بین فرم سیس انول و ترانس انول) (۴-۳-۴)
- ۸۲ بررسی محاسبات ترکیب ۷۲-دی هیدروکسی نفتازارین (۴-۴)
- ۸۲ بررسی پارامترهای ساختاری (۱-۴-۴)
- ۸۳ پیوند O8-H8 ... O1 (۱-۱-۴-۴)
- ۸۴ پیوند O5-H5...O4 (۲-۱-۴-۴)
- ۸۵ بررسی جابجایی شیمیایی در HNMR (۲-۴-۴)
- ۸۶ بررسی طیف ارتعاشی (۳-۴-۴)
- ۸۶ ناحیه $1700-3600\text{ cm}^{-1}$ (۱-۳-۴-۴)
- ۸۶ ناحیه $1000-1700\text{ cm}^{-1}$ (۲-۳-۴-۴)
- ۸۷ ناحیه زیر 1000 cm^{-1} (۳-۳-۴-۴)
- ۹۳ تخمین قدرت پیوند هیدروژنی (تفاوت بین فرم سیس انول و ترانس انول) (۴-۴-۴)
- ۹۴ بررسی محاسبات ترکیب ۶۲-دی هیدروکسی نفتازارین (۵-۴)
- ۹۴ بررسی پارامترهای ساختاری (۱-۵-۴)
- ۹۵ پیوند O8-H8 ... O1 (۱-۱-۵-۴)
- ۹۶ پیوند O5-H5...O4 (۲-۱-۵-۴)
- ۹۷ بررسی جابجایی شیمیایی در HNMR (۲-۵-۴)
- ۹۸ بررسی طیف ارتعاشی (۳-۵-۴)
- ۹۸ ناحیه $1700-3800\text{ cm}^{-1}$ (۱-۳-۵-۴)

- ۹۸ ناحیه $1000-1700\text{ cm}^{-1}$ (۲-۳-۵-۴)
- ۹۹ ناحیه زیر 1000 cm^{-1} (۳-۳-۵-۴)
- ۱۰۵ تخمین قدرت پیوند هیدروژنی (تفاوت بین فرم سیس انول و ترانس انول) (۴-۵-۴)
- ۱۰۶ بررسی محاسبات ترکیب ۷۶-دی هیدروکسی نفتازاین (۶-۴)
- ۱۰۶ بررسی پارامترهای ساختاری (۱-۶-۴)
- ۱۰۷ پیوند O1 ... O8-H8 (۱-۱-۶-۴)
- ۱۰۸ پیوند O4 ... O5-H5 (۲-۱-۶-۴)
- ۱۰۹ بررسی جابجایی شیمیایی در HNMR (۲-۶-۴)
- ۱۱۰ بررسی طیف ارتعاشی (۳-۶-۴)
- ۱۱۰ ناحیه $1700-3800\text{ cm}^{-1}$ (۱-۳-۶-۴)
- ۱۱۰ ناحیه $1000-1700\text{ cm}^{-1}$ (۲-۳-۶-۴)
- ۱۱۱ ناحیه زیر 1000 cm^{-1} (۳-۳-۶-۴)
- ۱۱۷ تخمین قدرت پیوند هیدروژنی (تفاوت بین فرم سیس انول و ترانس انول) (۴-۶-۴)
- ۱۱۸ مراجع

:

جدول ۱-۱) گستره های طول موج و فرکانس طیف بینی ماوراء بنفش، مرئی، زیر قرمز..... ۲۴

جدول ۲-۱) ضوابط طیف های زیر قرمز برای پیوند های هیدروژنی..... ۲۶

:

جدول ۱-۴) پارامترهای ساختاری مرتبط با پیوند هیدروژنی NZ..... ۵۸

جدول ۲-۴) پارامترهای ساختاری مربوط به پیوند هیدروژنی هیدروکسی نفتازارین..... ۵۹

جدول ۳-۴) پارامترهای ساختاری مربوط به قدرت پیوند هیدروژنی در DNZ1..... ۶۰

جدول ۴-۴) مقایسه جابجایی های شیمیایی DNZ1، HNZ1، HNZ2 و NZ در NMR..... ۶۵

جدول ۵-۴) انتساب فرکانس ترکیب DNZ1 در سطح پایه B3LYP..... ۶۸

جدول ۶-۴) انتساب فرکانس DNZ1 دوتره شده در سطح پایه B3LYP..... ۷۰

جدول ۷-۴) پارامترهای ساختاری مرتبط با پیوند هیدروژنی DNZ2..... ۷۴

جدول ۸-۴) مقایسه جابجایی شیمیایی DNZ2، HNZ1، HNZ2 و NZ..... ۷۸

جدول ۹-۴) انتساب فرکانس ترکیب DNZ2 در سطح B3LYP..... ۸۱

جدول ۱۰-۴) انتساب فرکانس DNZ2 دوتره شده در سطح B3LYP..... ۸۳

جدول ۱۱-۴) پارامترهای ساختاری مرتبط با قدرت پیوند هیدروژنی DNZ3..... ۸۷

جدول ۱۲-۴) مقایسه جابجایی شیمیایی DNZ3، HNZ1، HNZ2 و DNZ3..... ۹۱

جدول ۱۳-۴) انتساب فرکانس ترکیب DNZ3 در سطح B3LYP..... ۹۴

جدول ۱۴-۴) انتساب فرکانس DNZ3 دوتره شده در سطح B3LYP..... ۹۶

جدول ۱۵-۴) پارامترهای ساختاری مرتبط با پیوند هیدروژنی در DNZ4..... ۱۰۰

جدول ۴-۱۶) مقایسه جابجایی شیمیایی DNZ4، HNZ1، HNZ2 و NZ ۱۰۴

جدول ۴-۱۷) انتساب فرکانس DNZ4 در سطح B3LYP ۱۰۸

جدول ۴-۱۸) انتساب فرکانس DNZ4 دوتره شده در سطح B3LYP ۱۱۰

:

شکل (۱-۱) نمایش دهنده و پذیرنده هم زمان..... ۱۱

شکل (۲-۱) تابع پتانسیل دو کمینه‌ای نامتقارن..... ۱۸

شکل (۳-۱) تابع پتانسیل دو کمینه‌ای متقارن..... ۱۹

شکل (۴-۱) تابع پتانسیل تک کمینه‌ای متقارن..... ۲۰

:

شکل (۱-۲) یک اوربیتال نوع اسلیتری 1s مدلسازی شده بوسیله ی ترکیب خطی سه..... ۵۵

شکل (۲-۲) قطبش یک اوربیتال p بوسیله ی آمیزش با یک تابع d..... ۵۸

:

شکل (۱-۳) نمایش ساختار نفتازارین (۱) و شیکونین (۲)..... ۶۲

شکل (۲-۳) ساختارهای متفاوت پیشنهاد شده برای نفتازارین..... ۶۵

شکل (۳-۳) توتومری فرم های مختلف نفتازارین 1(A)-1(D)..... ۶۶

شکل (۲(۴-۳) - هیدروکسی نفتازارین (۱) و ۷- هیدروکسی نفتازارین (۲)..... ۶۸

شکل (۳-۵) ۲و۶- دی هیدروکسی نفتازارین (۱)، ۲و۷- دی هیدروکسی نفتازارین (۲)..... ۶۹

:

شکل (۱-۴) نمایش ساختار NZ..... ۵۹

شکل (۲-۴) نمایش ساختار ۲- هیدروکسی نفتازارین HNZI و ۷- هیدروکسی نفتازارین..... ۶۰

شکل ۳-۴) نمایش ساختار DNZ1 در حالتی که پیوند هیدروژنی تشکیل می شود..... ۷۳

شکل ۴-۴) نمایش ساختار ۷۲-دی هیدروکسی نفتازارین در حالات سیس انول ۸۰

شکل ۵-۴) نمایش ساختار ۶۲-دی هیدروکسی نفتازارین در حالات سیس انول و..... ۱۰۰

فصل اول:

مقدمه ای بر پیوند هیدروژنی

۱-۱) تاریخچه ی پیوند هیدروژنی

وجود بیش از دو هزار مرجع تفسیر شده در اولین کتابی که به طور کامل به پیوند هیدروژنی اختصاص دارد، نشان دهنده ی این است که مفهوم پیوند هیدروژنی باید خیلی زودتر به وضوح نمایان می شد. در آن زمان پیوند هیدروژنی آماده ی کشف شدن توسط تعدادی از کاشفان بود و شاید به همین دلیل است که هیچ جایزه ی نوبلی به طور خاص برای کشف پیوند هیدروژنی که در زیست شناسی مولکولی و شیمی ابر مولکول ها بسیار مهم است، داده نشده است.

همان طور که گفته شد پیوند هیدروژنی به دلیل تأثیر واضحی که در شیمی حالت گاز، مایع و جامد دارد، مدت ها قبل از این که شناسایی و نام گذاری شود، مشاهده شده بود. نوشته های پژوهشی اواخر قرن نوزده و اوایل قرن بیستم می توانند به عنوان مدرکی برای پیوند هیدروژنی باشند. عبارت های نزدیک والانس^۱ و ساختار کمپلکس درونی^۲ توسط شیمیدانان آلمانی ورنر^۳ [۱] (۱۹۰۲)، هانتز^۴ [۲] (۱۹۱۰) و فیفر^۵ [۳] (۱۹۱۴) برای شرح دادن پیوندهای هیدروژنی بین مولکولی و درون مولکولی به کار رفتند. آلمانی ها می تواند ادعا کنند که این ها کاشفان پیوند هیدروژنی بوده اند. اولین مقاله ی قطعی درباره ی پیوند هیدروژنی توسط لاتیمر^۶ [۴] و رودبوش^۷ [۵] در سال ۱۹۲۰ منتشر شد که شامل این جمله بود: «هسته ی هیدروژن توسط دو هشتایی نگه داشته شده که یک پیوند ضعیف را تشکیل می دهند.»

1.Nebervalenz

2.Inner Complexsalzbildung

3.Werner

4.Hantzsch

5.Pfeiffer

6. W.M. Latimer

7. W.M. Rodebush

شرح دهنده ی پیوند هیدروژنی بعد از سال ۱۹۳۰ ظاهر شد. لینوس پاولینگ^۱ [۶] (۱۹۳۱) مقاله ای کلی در مورد طبیعت پیوند شیمیایی نوشت. او با به کار گیری عبارت پیوند هیدروژنی احتمالاً برای اولین بار در مورد یون $[H : F : H]^-$ بحث کرد. او اظهار داشت که چنین پیوندهایی تا اندازه ای توسط اتم اکسیژن و در برخی موارد توسط اتم هیدروژن تشکیل شده اند.

در سال های ۱۹۳۵-۱۹۳۶ مقالاتی در مورد پیوندهای هیدروژنی در آب و یخ [۷] و یک سال بعد دو مقاله مهم توسط هیوگینز^۲ در مورد پل های هیدروژنی^۳ در آب و یخ و دیگری در مورد پل های هیدروژنی در ترکیبات آلی بود. در این مقالات هیوگینز [۸] در مورد الگوهای پیوند هیدروژنی در اسیدهای کربوکسیلیک بحث کرد و به نقش پیوند هیدروژنی برای چین خوردگی رشته های کراتین اشاره کرد و هم چنین او پیش بینی کرد که «نظریه ی پل هیدروژنی به یک فهم بهتر از طبیعت و رفتار ساختارهای آلی پیچیده مثل پروتئین ها، نشاسته، سلولز و سایر کربوهیدرات ها، کلروفیل، هموگلوبین و ساختار های وابسته منجر خواهد شد».

قبل از سال ۱۹۳۶، ویژگی های فیزیکی غیر عادی و اندازه گیری های ترمودینامیکی کمک به شناخت پیوند هیدروژنی می کردند. اما در سال ۱۹۳۶ طیف بینی IR به عنوان یک ابزار حساس و قابل دسترس برای شناسایی تشکیل پیوند هیدروژنی به کار رفت. اولین متنی که به طور کامل به پیوند هیدروژنی اختصاص داشت، کتاب پیوند هیدروژنی نوشته شده توسط پیمنتال^۴ و مک کلان^۵

1. Linus Pauling
2. Huggins
3. Hydrogen - Bridges
4. Pimental

کلان^۱ (۱۹۶۰) بود. این کتاب معروف تمام پدیده های مربوط به پیوند هیدروژنی را شرح می دهد و هنوز هم مفید است [۹].

امروزه به طور متوسط ۸۰ مقاله در سال در مورد پیوند هیدروژنی با به کار گیری این روش ها منتشر می شود.

۱-۲) مقدمه ای بر پیوند هیدروژنی

نیروهای بین مولکولی مفهومی اساسی در نظریه ی مولکولی هستند. نیروهای بین مولکولی در تعیین ساختار و خواص فیزیکی و بیولوژیکی مواد بسیار مهم هستند. از ابتدای پیدایش نظریه ی اتم و مولکول نیروهای موجود بین آن ها دغدغه ای مهم برای بشر بوده است. رفتار فیزیکی جهان توسط همین نیروهای بین ذرات کنترل می شود. این نیروها می توانند خیلی ضعیف در حد جاذبه ی زمین یا بسیار قوی در حد نیروی جاذبه ی درون هسته باشند. برای مثال نسبت نیروی جاذبه دو نوترون داخل هسته به نیروی جاذبه ی زمین^{۳۸} 10^{38} به ۱ می باشد. نیروی جاذبه بین اتم ها و مولکول ها بین این دو حد قرار دارند. نیروهای جاذبه بین اتمی باید آنقدر قوی باشند که سیستم های پایداری را ایجاد کنند و البته نه آن قدر قوی که مانع انجام واکنش شوند [۱۰].

نیروهای مورد بررسی در شیمی الکترواستاتیک هستند که به دو دسته تقسیم می شوند:

❖ نیروهای اولیه: نیروهایی که اتم ها را در مولکول و نمک های کرسیتالی کنار هم نگه می دارند.

❖ نیروهای ثانویه: نیروهایی که حالات مجتمع ماده را ایجاد می کنند.

1. McClellan

انرژی لازم برای غلبه بر نیروهای اولیه $200-600 \text{ kJ.mol}^{-1}$ می باشد و انرژی لازم برای غلبه بر نیروهای ثانویه حدود $5-10 \text{ kJ.mol}^{-1}$ است. تفاوت این دو نیرو در این است که نیروهای ثانویه ضعیف و معمولاً فاقد جهت گیری هستند. پیوند هیدروژنی گونه ای از نیروهای ثانویه است که ضعیف ولی دارای جهت گیری است و به سهولت می توان واحدهایی جدا و مشخص را برای آن تشخیص داد [۱۱].

ماهیت پروتون و نبودن هیچ حایلی در مقابل بار هسته باعث شده هیدروژن فعالیت هایی منحصر به فرد داشته باشد. یکی از این فعالیت ها پیوند هیدروژنی است. مطالعه ی این پیوند نه تنها برای درک شیمی هیدروژن اساسی، بلکه تنها نیروی جاذبه بین مولکولی است که به این وسعت مطالعات بر روی آن انجام شده است [۱۲].

پیوندهای هیدروژنی در سیستم های بیولوژیکی از اهمیت بسیاری برخوردارند. این پیوند در بسیاری از پدیده های مهم طبیعی از جمله علوم زیستی و بیوشیمی نقش اساسی دارد. پیوند هیدروژنی در اسیدهای آمینه، پروتئین ها که سازنده ی اصلی آنزیم ها هستند، غشای سلول ها، DNA و RNA وجود دارد. انتقال پروتون (از طریق پدیده ی تونل زنی) به زنجیر دیگر تغییراتی در DNA و RNA، این مولکول های حیاتی، ایجاد می کند. هم چنین اتصال مجدد در این دو مولکول با تغییراتی همراه است که ارتباط مستقیم با پیوند هیدروژنی دارد [۱۳].

بازهای سازنده ی نوکلئیک اسیدها (آدنین، تیمین، گوانین و اوراسیل) در برهمکنش های بین مولکولی شرکت می کنند [۱۴-۱۶]. از بین همه ی برهمکنش ها، برهمکنش پیوند هیدروژنی از اهمیت بیشتری برخوردار است [۱۷]. در پروتئین ها پیوند هیدروژنی بین اکسیژن و هیدروژن

1. Deoxy Ribo Nucleic Acid
2. Ribo Nucleic Acid

آمیدی تشکیل می شود. عمل تونل زنی در پیوند هیدروژنی بین دو باز مزدوج در دزوکسی ریبونوکلیک اسید که اساس تولید مثل ژنتیکی است، موجب انتقال هیدروژن از یک محل تعادلی به محل دیگر شده و این انتقال باعث ایجاد خطا در کدهای ژنتیکی می شود و همین امر باعث تغییرات اساسی در وضعیت ژنتیکی یک موجود زنده می شود. این فرایند که جهش نامیده می شود با پیوند هیدروژنی ارتباط مستقیم دارد [۱۸].

پیش بینی خواص پیوند هیدروژنی درون مولکولی و بین مولکولی یکی از مهم ترین مسائل در علم شیمی است. پیوند هیدروژنی نقش مهمی در پدیده های زیست شیمیایی، واکنش های شیمیایی، تشکیل کریستال ها و غیره دارد [۱۹]. پیوند هیدروژنی درون مولکولی اگر چه ضعیف تر از پیوند هیدروژنی بین مولکولی است اما اثرات زیادی روی خواص مولکولی مثل پایداری نسبی صورت بندی ها، توزیع بار در مولکول ها و واکنش پذیری آن ها دارد [۲۰]. پیوندهای هیدروژنی درون مولکولی نقش مهمی در نگه داشتن ساختار مواد زیست شیمیایی از جمله ساختارهای تاخورده و پیچ خورده پروتئین ها و مارپیچ دو تایی DNA دارد [۲۱].

۱-۳) توصیف پیوند هیدروژنی

عقیده ی قدیمی شیمی کلاسیک بر این اصل استوار بود که اتم هیدروژن دارای ظرفیت یک است اما کم کم شیمی دانان متوجه شدند که گاهی اتم هیدروژن می تواند با دو اتم پیوند دهد و این اساسی برای مفهوم پیوند هیدروژنی شد [۲۲].

پیوند هیدروژنی یک برهمکنش دهنده - پذیرنده است که شامل اتم های هیدروژن است. A برای دهنده ی پیوند هیدروژنی به خاطر شباهت با اسید برونشتد - لوئیس^۱ و B برای پذیرنده ی پیوند هیدروژنی به خاطر شباهت با باز برونشتد- لوئیس به کار می رود. اگر چه تفاوت بنیادی بین پروتون دهنده گی و پیوند هیدروژنی وجود دارد.

پیوند هیدروژنی وقتی تشکیل می شود که الکترونگاتیویته ی A نسبت به H در پیوند کوالانسی A - H آنقدر باشد که الکترون ها را به سمت خود بکشد و پروتون را به طور جزئی ناپوشیده کند. حال برای برهمکنش با این پیوند A - H، B پذیرنده باید جفت الکترون ناپیوندی یا الکترون های π قطبش پذیر داشته باشد. علی رغم این توصیف ساده فهمیدن طبیعت الکترونی پیوند هیدروژنی نسبت به پیوندهای کوالانسی و یونی و نیروهای واندروالس دشوارتر است و این به علت وسیع تر بودن گستره ی برهمکنش پیوند هیدروژنی است.

پیوند های هیدروژنی بسیار قوی شبیه پیوندهای کوالانسی و پیوندهای هیدروژنی بسیار ضعیف شبیه به نیروهای واندروالس هستند. اما بیشتر پیوندهای هیدروژنی بین این دو حد توزیع شده اند. قدرت یک پیوند هیدروژنی بستگی به اتم های A و B از جمله الکترونگاتیویته و بارهای خالص اتمی دارد. A و B می توانند هر اتمی مثل کربن، نیتروژن، فسفر، اکسیژن، گوگرد، فلئور، برم، کلر و یا ید باشند و علاوه بر این ها B می تواند یک الکترون دهنده π یا δ باشد.

پیوند هیدروژنی به صورت آزاد می تواند خطی باشد که این بیشتر در پیوندهای هیدروژنی بین مولکولی است اما در نوع درون مولکولی معمولاً از حالت خطی انحراف دارد [۲۳].

1. Bronsted-Lewis Acid