



دانشگاه بیرجند
دانشکده علوم

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی پیوند هیدروژنی دوتایی در ترکیب ۲- بورانیل اتن تیول

استاد راهنما:

دکتر حیدر رئیسی

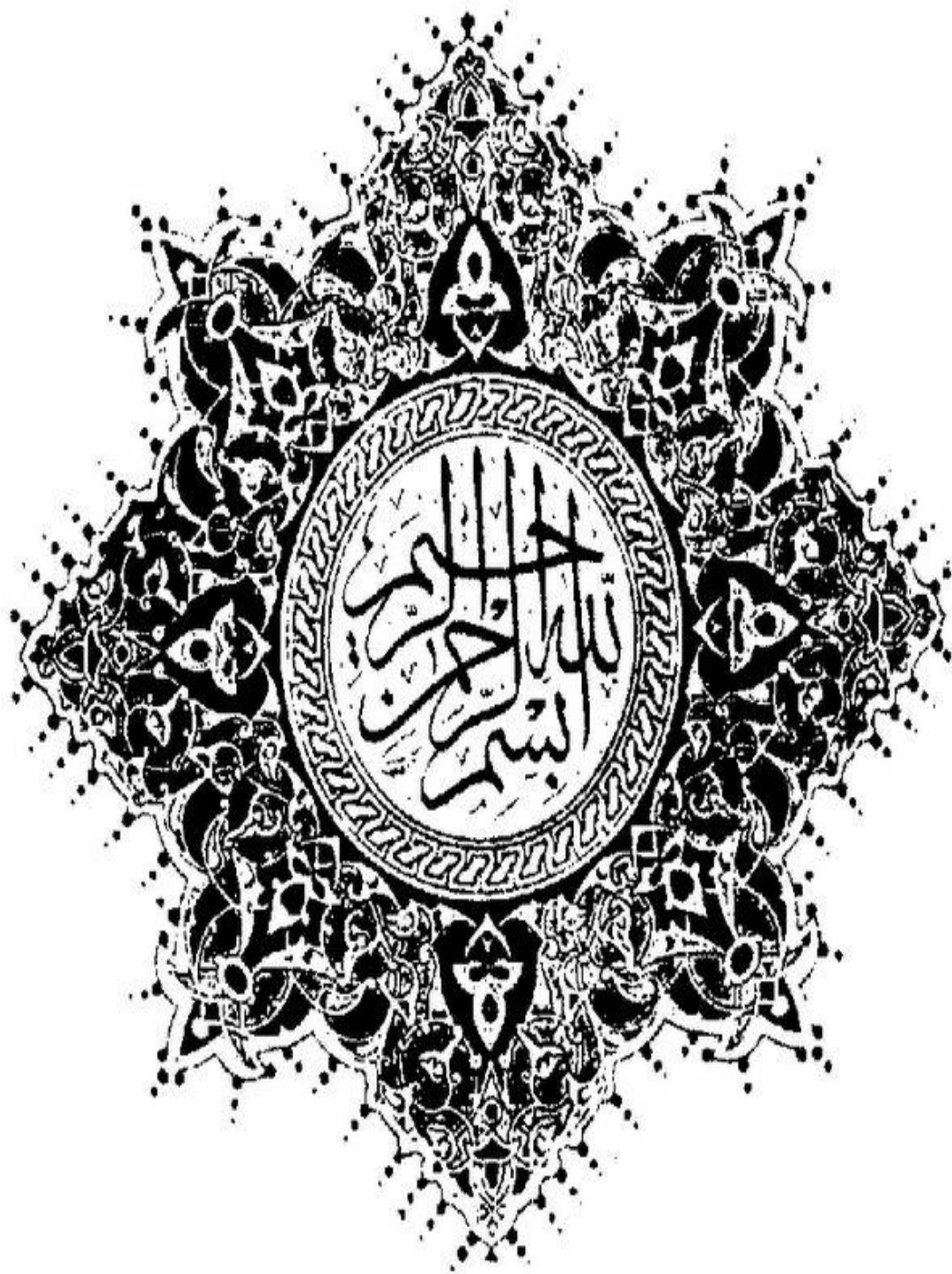
استاد مشاور:

دکتر فرزانه فرزاد

نگارش:

الهه محمدی نژاد

شهریور ماه ۹۲



فرم شماره ۱۰

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد



با تاییدات خداوند متعال جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی کارشناسی ارشد خانم / آقای الهه محمدی نژاد به شماره دانشجویی: ۹۰۱۳۱۲۷۰۰۷ رشته: شیمی گرایش: شیمی فیزیک دانشکده: علوم تحت عنوان: بررسی پیوند هیدروژنی دوتایی در ترکیب ۲-بورانیل اتن تیول به ارزش: ۶ واحد در ساعت : ۱۲ روز : پنجشنبه مورخ: ۹۲/۰۶/۲۸

با حضور اعضای محترم جلسه دفاع و نماینده تحصیلات تکمیلی به شرح ذیل تشکیل گردید:

سمت	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضاء
استاد راهنمای اول	دکتر حیدر رئیسی	دانشیار	
استاد راهنمای دوم			
استاد مشاور اول	دکتر فرزانه فرزاد		
استاد مشاور دوم			
داور اول	دکتر حسین فرسی	استادیار	
داور دوم	دکتر محمد علی ناصری	دانشیار	
نماینده تحصیلات تکمیلی	مهندس احمد حاجی زاده	مربی	

نتیجه ارزیابی دفاع که منوط به ارائه اصلاحات پیشنهادی توسط هیئت داوران حداکثر ظرف مدت یکماه پس از تاریخ دفاع می باشد، به شرح زیر مورد تایید قرار گرفت:

قبول (با درجه: عالی و امتیاز: ۱۹/۱۵) دفاع مجدد غیر قابل قبول
۱- عالی (۲۰-۱۹) ۲- بسیار خوب (۱۸-۱۸/۹۹) ۳- خوب (۱۶-۱۷/۹۹) ۴- قابل قبول (۱۵/۹۹-۱۴)

(بدیهی است عواقب آموزشی ناشی از عدم ارائه به موقع اصلاحات مزبور به عهده دانشجو می باشد)

از ... و اقتباس ترجمه، برداری، نسخه تکثیر، چاپ، از اعم مزایا کلیه
با مطلب نقل است محفوظ بپیرجند دانشگاه ارشد برای کارشناسی پایان‌نامه
است بلامانع منبع ذکر

پروردگارا تو تکراری ترین "حضور" روزگار منی و من عجیب به آغوش تو از آن سوی فاصله ها خو گرفته ام

با امید به فرج آقا امام زمان (عج) ، پایان نامه خود را به:

پدرم

آموزگار بزرگ مجاهده و بردباری! اندیشیدن فرداهای دور را از تو آموختم .چین های صورتت، نقشه سال های کودکی من است. تو روزها و شب های پر ستاره را با من نفس کشیده ای و من، پیر شدن آسمانم را نظاره گر بوده ام؛ اما کهنه شدن غرورش را هرگز...

مادرم

شعر وجود تو را، واژه واژه می نوشتم و رعناترین غزال غزل هایم را به سویت روانه می کنم. دو بیت های احساسم را همراه با شادمانه ترین ترانه فصل های زندگی ام، نثار دل بهاری ات می کنم. ای بهترین شعر زندگی...

همسرم

تو معنای واقعی دوست داشتن را با صبوری به من آموختی. تو مرا به باور رساندی به باور آن همه عشق و زیبایی وجود تو و گرمای صداقت به من خسته، زندگی می بخشد...

خواهرم

تو که وجودت مایه ی آرامش من و دعایت همراه من است...

اتریسای گلم

هدیه ام از تولد تو بهار بود

که شکوفه هایش را تا همیشه در قلبم جا کردی دوستت دارم

تقدیم می کنم.

و از بوی نفس های تو رنج دنیا را از یاد می برم...

تقدیر و تشکر:

سپاس و ستایش خدای را که هر چه دارم از اوست و هر چه خواهم از اوست.

از استاد راهنمای بزرگوارم جناب آقای دکتر حیدر رئیسی، به خاطر همراهی و راهنمایی های بی نظیرشان و به خاطر صفات برگزیده اخلاقی و علمی ایشان.

از استاد مشاور محترم سرکار خانم دکتر فرزانه فرزاد، بابت راهنمایی های صمیمانه ایشان.

از پدرم، اول استادم، که همواره چتر محبتش بر سرم است بزرگواری که الفبای زندگی را از او آموختم

از مادرم، بلند تکیه گاهم، که دامن پر مهرش یگانه پناهم است مهربانی که عشق ورزیدن را از او آموختم

از همسرم او که نفس هایش تنها بهانه نفس کشیدنم و وجودش تنها دلیل زنده بودنم است

از بهترین هدیه زندگیم او که زیباترین لحظاتم را به پای ساده ترین دقایقش میریزم تا بداند او را برای او دوست دارم

از خواهرم که زیبا ترین و مونس ترین حقیقت زندگی من است

در نهایت از دوست عزیزم خانم زهرا خوشبین و فریبا ملانیا که کمک های بی پایان آنها همیشه همراه من است و تمام

دوستان آزمایشگاه کمال تشکر را دارم.

عنوان

بررسی پیوند هیدروژنی دوتایی در ترکیب ۲-بورانیل اتن تیول

به‌وسیله‌ی

الهه محمدی نژاد

چکیده

ترکیب ۲-بورانیل اتن تیول و ۲۵ استخلاف‌اش به عنوان مدل دربردارنده‌ی پیوند هیدروژنی دوتایی در سطح B3LYP با تابع پایه **G+۳۱۱-۶ جهت تعیین ترتیب پایداری و امکان تشکیل پیوند هیدروژنی درون مولکولی بهینه شده‌اند. برای این ترکیب استخلاف‌های OH، CF₃، CH₃، CH₂OH، CH₂CL، CH₂F، NHCOCH₃، NHCH₃، NH₂، NO₂، F، CL، Br، OCHF₂، COH و CH₂OCH₃، CH₂CF₃، C₂H₅، CH₂COOH، CN، OCF₃، OCH₃، SCF₃، SCH₃، SH، مدل PCM در سطح DFT/B3LYP برای تعیین اثر حلال و استخلاف‌ها بر ساختار و پیوند هیدروژنی استفاده شد. انرژی پیوند هیدروژنی برای این سیستم‌ها از روش اسپینوزا به‌دست می‌آید. نتایج محاسبات در دو فاز نشان می‌دهند که استخلاف COCH₃ نسبت به سایر استخلاف‌ها پایدارتر است. به منظور مقایسه قدرت پیوند هیدروژنی، فرکانس‌های ارتعاشی و خمشی پیوندهای S-H و B-H محاسبه شده‌اند. نقاط بحرانی و طبیعت پیوند هیدروژنی توسط تئوری اتم در مولکول بادر مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. نتایج حاصل نشان می‌دهد که ρ کوچک و $\nabla^2\rho$ کوچک و مثبت است که نشان دهنده‌ی ویژگی الکترواستاتیک پیوند H...H است. در نهایت آنالیز پیوند هیدروژنی در این مولکول‌ها با نظریه AIM به خوبی نتایج قبلی را تایید می‌کند. بررسی‌های اوربیتال پیوندی طبیعی (NBO) برای فهم بهتر ماهیت پیوند هیدروژنی درون مولکولی انجام شده است. روش NBO، طیف بینی NMR و جابه‌جایی شیمیایی، به خوبی فرکانس‌های کششی، به منظور ارزیابی برهم‌کنش‌های پیوند هیدروژنی برای تمام مشتقات در همان سطح محاسبه شده‌اند. محاسبات بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) و پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (LUMO) با فاصله اوربیتال‌های جبهه‌ای موجوداند.

کلید واژه: پیوند هیدروژنی دوتایی، نظریه اوربیتال‌های پیوندی طبیعی، نظریه‌ی اتم در مولکول، لاپلاسن، دانسیته الکترونی.

ABBREVIATION

NMR: Nuclear Magnetic Resonance

CI: Configuration Interaction

CNDO: Complete NDO

INDO: Intermediate NDO

MINDO: Modified INDO

DFT: Density Function Theory

AIM: Atoms In Molecules

CP: Critical Points

RCP: Ring Critical Point

NBO: Natural Bond Orbitals

NAO: Natural Atomic Orbital

ON: Occupation Number

GIAO: Gauge Including Atomic Orbital

IRC: Intrinsic Reaction Coordinate

SCF: Self-consistent field

NHO: Natural Hybrid Orbitals

فهرست مطالب

عنوان

فصل اول شیمی محاسباتی

صفحه

۲	۱-۱ مقدمه
۲	۱-۱-۱ تعریف
۲	۲-۱-۱ تاریخچه
۳	۲-۱ شیمی محاسباتی
۴	۳-۱ دلایل ظهور مکانیک کوانتومی
۵	۱-۳-۱ نظریه دوپروی در مکانیک کوانتومی
۶	۲-۳-۱ زمینه ظهور مکانیک کوانتومی
۶	۳-۳-۱ حوزه عمل مکانیک کوانتومی
۷	۴-۱ تعریف اصل
۷	۱-۴-۱ پیدایش عدم قطعیت هایزنبرگ
۹	۲-۴-۱ فرضیه پلانک
۹	۳-۴-۱ اصل عدم قطعیت هایزنبرگ
۱۱	۵-۱ احتمال
۱۲	۶-۱ ذره آزاد
۱۲	۷-۱ معادله شرودینگر
۱۳	۱-۷-۱ معادله شرودینگر وابسته به زمان
۱۳	۲-۷-۱ معادله شرودینگر مستقل از زمان
۱۴	۸-۱ خصوصیات معادله شرودینگر
۱۴	۹-۱ کاربرد معادله شرودینگر
۱۵	۱۰-۱ معادله تابع موجی
۱۵	۱۱-۱ طبقه بندی روش های مختلف کوانتومی
۱۵	۱-۱۱-۱ روش های سری آغازین
۱۶	۱-۱-۱۱-۱ تقریب هارتری-فاک
۱۷	۲-۱-۱۱-۱ همبستگی
۱۸	۳-۱-۱۱-۱ نظریه اختلال مولر-پلست
۲۰	۴-۱-۱۱-۱ بر هم کنش پیکربندی
۲۱	۵-۱-۱۱-۱ میدان خود سازگار چند پیکربندی
۲۲	۶-۱-۱۱-۱ خوشه جفت شده

۲۲	۷-۱-۱۱-۱ تقریب بورن اپنهايمر
۲۲	۱-۱-۱۱-۱ ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی
۲۳	۹-۱-۱۱-۱ مجموعه پایه شکافت ظرفیت
۲۴	۱۰-۱-۱۱-۱ مجموعه پایه قطبشی
۲۴	۱۱-۱-۱۱-۱ مجموعه پایه نفوذی
۲۵	۲-۱۱-۱ روش‌های نیمه تجربی
۲۵	۱-۲-۱۱-۱ روش هوکل
۲۶	۲-۲-۱۱-۱ روش هوکل توسعه یافته
۲۶	۳-۲-۱۱-۱ روش چشم‌پوشی از همپوشانی دیفرانسیلی NDO
۲۷	۱-۳-۲-۱۱-۱ روش CNDO
۲۷	۱-۱-۳-۲-۱۱-۱ هدف و سابقه
۲۷	۲-۳-۲-۱۱-۱ روش MINDO
۲۸	۳-۳-۲-۱۱-۱ روش MNDO
۲۸	۴-۳-۲-۱۱-۱ روش ZINDO
۲۹	۵-۳-۲-۱۱-۱ روش SINDO
۲۹	۶-۳-۲-۱۱-۱ روش PPP
۲۹	۷-۳-۲-۱۱-۱ روش AM1
۳۰	۸-۳-۲-۱۱-۱ روش PM3
۳۰	۳-۱۱-۱ نظریه تابعی چگالی
۳۳	۱-۳-۱۱-۱ تئوری اتم‌ها در مولکول‌ها
۳۳	۱-۱-۳-۱۱-۱ مقدمه
۳۴	۲-۱-۳-۱۱-۱ دانسیته الکترونی
۳۴	۱-۲-۱-۳-۱۱-۱ از تابع موج به چگالی الکترونی
۳۴	۲-۲-۱-۳-۱۱-۱ چگالی ابر الکترونی
۳۶	۳-۱-۳-۱۱-۱ نقاط بحرانی
۳۶	۴-۱-۳-۱۱-۱ دانسیته الکترونی در BCP (ρ_b)
۳۷	۵-۱-۳-۱۱-۱ لاپلاسیان ($L(\Omega)$)
۳۷	۶-۱-۳-۱۱-۱ تشخیص پیوند هیدروژنی به کمک نظریه AIM
۳۸	۷-۱-۳-۱۱-۱ یافتن IAS، BP و BCP در هر پیوند هیدروژنی
۳۸	۲-۳-۱۱-۱ نظریه اوربیتال‌های پیوندی طبیعی (NBO)
۳۹	۳-۳-۱۱-۱ اوربیتال طبیعی (NO)

۴۰	۴-۳-۱۱-۱ اوریتال های اتمی طبیعی NAO
۴۰	۵-۳-۱۱-۱ اوریتال های هیبریدی طبیعی NHO
۴۰	۶-۳-۱۱-۱ محاسبه انرژی اختلال مرتبه دوم توسط NBO
۴۱	۱۲-۱ مدل PCM
۴۱	۱-۱۲-۱ مدل IPCM
۴۲	۲-۱۲-۱ مدل SCIPCM
۴۲	۳-۱۲-۱ مدل IEFPCM
۴۲	۴-۱۲-۱ روش SCRF انزاگر-کوانتومی
۴۳	۵-۱۲-۱ روش بسط-چند قطبی
۴۴	فصل دوم بررسی اثر استخلاف روی ترکیب ۲-بورانیل اتن تیول
۴۵	۱-۲ مقدمه
۴۵	۱-۱-۲ تعریف پیوند هیدروژنی
۴۵	۲-۱-۲ نحوه تشکیل پیوند هیدروژنی
۴۶	۳-۱-۲ شرایط تشکیل پیوند هیدروژنی
۴۶	۴-۱-۲ توجیه خواص غیر عادی برخی از مواد
۴۷	۵-۱-۲ پیوند هیدروژنی و انحلال پذیری ترکیبات مختلف
۴۷	۶-۱-۲ نقش پیوند هیدروژنی در سیستم‌های زنده
۴۸	۷-۱-۲ پیوند هیدروژنی متقارن
۴۹	۲-۲ روش محاسبات
۵۱	۳-۲ بررسی اثر استخلاف ها بر ساختار، قدرت پیوند هیدروژنی ترکیب ۲-بورانیل اتن تیول در موقعیت R در فاز گازی
۵۱	۱-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-پروپن-۱-تیول (CH ₃ -BET)
۵۲	۱-۱-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۵۲	۲-۱-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۵۳	۲-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۲-کلرو-اتن تیول (Cl-BET)
۵۴	۱-۲-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۵۴	۲-۲-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۵۵	۳-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۳-مرکاپتو-اکریلونیتریل (CN-BET)
۵۶	۱-۳-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۵۶	۲-۳-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۵۶	۴-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۲-فلورو-اتن تیول (F-BET)

۵۷	۱-۴-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۵۸	۲-۴-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۵۸	۵-۳-۲ ترکیب ۲-امینو-۲-بورانیل-اتن تیول (NH ₂ -BET)
۵۹	۱-۵-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۵۹	۲-۵-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۶۰	۶-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۲-نیترو-اتن تیول (NO ₂ -BET)
۶۱	۱-۶-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۶۱	۲-۶-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۶۱	۷-۳-۲ ترکیب ۱-بورانیل-۲-مرکاپتو-اتنول (OH-BET)
۶۲	۱-۷-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۶۳	۲-۷-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۶۳	۸-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۲-متوکسی-اتن تیول (OMe-BET)
۶۴	۱-۸-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۶۴	۲-۸-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۶۵	۹-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۲-متیل سولفانیل-اتن تیول (SCH ₃ -BET)
۶۶	۱-۹-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۶۶	۲-۹-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۶۷	۱۰-۳-۲ ترکیب ۱-بورانیل-اتن-۱ و ۲-دی تیول (SH-BET)
۶۸	۱-۱۰-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۶۸	۲-۱۰-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۶۸	۱۱-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۳-متیل-بوتا-۱ و ۳-دی ان-۱ تیول (COCH ₃ -BET)
۷۰	۱-۱۱-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۷۰	۲-۱۱-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۷۰	۱۲-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-بوتا-۱ و ۳-دی ان-۱ تیول (COH-BET)
۷۲	۱-۱۲-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۷۲	۲-۱۲-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۷۲	۱۳-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۳ و ۳ و ۳-تری فلورو-پروپن-۱ تیول (CF ₃ -BET)
۷۴	۱-۱۳-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۷۴	۲-۱۳-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۷۴	۱۴-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۲-برومو-اتن تیول (Br-BET)
۷۵	۱-۱۴-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM

۷۶	۲-۱۴-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۷۶	۲-۱۵-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-بوت-۱-ان-۱-تیول (C ₂ H ₅ -BET)
۷۷	۲-۱۵-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۷۷	۲-۱۵-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۷۸	۲-۱۶-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۲-متیل امینو-اتن تیول (NHCH ₃ -BET)
۷۹	۲-۱۶-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۷۹	۲-۱۶-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۸۰	۲-۱۷-۳-۲ ترکیب N-(۱-بورانیل-۲-مرکاپتو-وینیل)-استامید (NHCOCH ₃ -BET)
۸۱	۲-۱۷-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۸۱	۲-۱۷-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۸۱	۲-۱۸-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۳-فلورو-پروپن-۱-تیول (CH ₂ F-BET)
۸۳	۲-۱۸-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۸۳	۲-۱۸-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۸۳	۲-۱۹-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۳-کلرو-پروپن-۱-تیول (CH ₂ Cl-BET)
۸۴	۲-۱۹-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۸۵	۲-۱۹-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۸۵	۲-۲۰-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۳-مرکاپتو-پروپ-۲-ان-۱-ال (CH ₂ OH-BET)
۸۶	۲-۲۰-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۸۶	۲-۲۰-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۸۷	۲-۲۱-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۲-دی فلورو متوکسی-اتن تیول (OCHF ₂ -BET)
۸۸	۲-۲۱-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۸۸	۲-۲۱-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۸۹	۲-۲۲-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۲-تری فلورومتیل سولفانیل-اتن تیول (SCF ₃ -BET)
۹۰	۲-۲۲-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۹۰	۲-۲۲-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۹۰	۲-۲۳-۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل-۴و۴و۴-تری فلورو-بوت-۱-ان-۱-تیول (CH ₂ CF ₃ -BET)
۹۱	۲-۲۳-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM
۹۲	۲-۲۳-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۹۲	۲-۲۴-۳-۲ ترکیب ۳-بورانیل-۴-مرکاپتو-بوت-۳-انوییک اسید (CH ₂ COOH-BET)
۹۳	۲-۲۴-۳-۲ تجزیه و تحلیل AIM

۹۴	۲-۲۴-۳-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۹۴	۲-۳-۲۵ ترکیب ۲-بورانیل-۳-متوکسی-پروپن-۱-تیول (CH ₂ OCH ₃ -BET)
۹۵	۲-۳-۲۵-۱ تجزیه و تحلیل AIM
۹۵	۲-۳-۲۵-۲ تجزیه و تحلیل NBO
۹۶	۲-۴ فاصله پیوند
۹۶	۲-۵ تجزیه و تحلیل AIM و انرژی پیوند هیدروژنی درون مولکولی B-H...H-S
۱۰۱	۲-۶ جابه‌جایی شیمیایی هیدروژن ¹ H (δ _H)
۱۰۲	۲-۷ فرکانس کششی پیوند
۱۰۳	۲-۸ ثوابت استخلاف
۱۰۴	۲-۹ بررسی سیستم‌ها در موقعیت R ترکیب 2-BET
۱۰۷	۲-۱۰ تجزیه و تحلیل NBO
۱۰۸	۲-۱۱ اوربیتال‌های مولکولی جبهه‌ای
۱۰۹	۲-۱۲ سختی شیمیایی و انرژی یونش
۱۱۰	فصل سوم بررسی استخلافات مختلف ترکیب ۲-بورانیل اتن تیول در فاز محلول
۱۱۱	۳-۱ مقدمه
۱۱۱	۳-۱-۱ بررسی پیوند هیدروژنی دوتایی در ترکیب ۲-بورانیل اتن-تیول در حلال اب
۱۱۲	۳-۲ روش انجام محاسبات
۱۱۲	۳-۳ فاصله پیوند
۱۱۳	۳-۴ انرژی پیوند B-H...H-S

فهرست اشکال

- شکل ۱-۲ پیوند هیدروژنی در مولکول اب ۴۶
- شکل ۲-۲ نمونه ای از پیوند هیدروژنی بین مولکولی ۴۷
- شکل ۳-۲ ترکیب ۲-بورانیل اتن-تیول ۴۹
- شکل ۴-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-پروپن-۱-تیول ۵۱
- شکل ۵-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۲-کلرو-اتن تیول ۵۳
- شکل ۶-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ترکیب ۲-بورانیل-۳-مرکاپتو-اکریلونیتریل ۵۵
- شکل ۷-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۲-فلورو-اتن تیول ۵۷
- شکل ۸-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-امینو-۲-بورانیل-اتن تیول ۵۸
- شکل ۹-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۲-نیترو-اتن تیول ۶۰
- شکل ۱۰-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۱-بورانیل-۲-مرکاپتو-اتنول ۶۲
- شکل ۱۱-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۲-متوکسی-اتن تیول ۶۳
- شکل ۱۲-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۲-متیل سولفانیل-اتن تیول ۶۵
- شکل ۱۳-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۱-بورانیل-اتن-۱و۲-دی تیول ۶۷
- شکل ۱۴-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ترکیب ۲-بورانیل-۳-متیل-بوتا-۱و۳-دی ان-۱-تیول ۶۹
- شکل ۱۵-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-بوتا-۱و۳-دی ان-۱-تیول ۷۱
- شکل ۱۶-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۳و۳و۳-تری فلورو-پروپن-۱-تیول ۷۳
- شکل ۱۷-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۲-برومو-اتن تیول ۷۵
- شکل ۱۸-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-بوت-۱-ان-۱-تیول ۷۶
- شکل ۱۹-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۲-متیل امینو-اتن تیول ۷۸
- شکل ۲۰-۲ ساختار بهینه شده ترکیب N-(۱-بورانیل-۲-مرکاپتو-وینیل)-استامید ۸۰
- شکل ۲۱-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۳-فلورو-پروپن-۱-تیول ۸۲
- شکل ۲۲-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۳-کلرو-پروپن-۱-تیول ۸۴
- شکل ۲۳-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۳-مرکاپتو-پروپ-۲-ان-۱-ال ۸۵
- شکل ۲۴-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۲-دی فلورو متوکسی-اتن تیول ۸۷
- شکل ۲۵-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ترکیب ۲-بورانیل-۲-تری فلورومتیل سولفانیل-اتن تیول ۸۹
- شکل ۲۶-۲ ساختار بهینه شده ترکیب ترکیب ۲-بورانیل-۴و۴و۴-تری فلورو-بوت-۱-ان-۱-تیول ۹۱

- شکل ۲-۲۷ ساختار بهینه شده ترکیب ۳-بورانیل-۴-مرکاپتو-بوت-۳-انویک اسید ۹۲
- شکل ۲-۲۸ ساختار بهینه شده ترکیب ۲-بورانیل-۳-متوکسی-پروپن-۱-تیول ۹۴
- شکل ۲-۲۹ نمودار $\nabla^2 \rho (H...H)$ در برابر طول فاصله $H...H$ ۹۷
- شکل ۲-۳۰ نمودار $\rho (H...H)$ در برابر طول فاصله $H...H$ ۹۷
- شکل ۲-۳۱ نمودار دانسیته پیوند $H...H$ در برابر دانسیته حلقه ۹۸
- شکل ۲-۳۲ نمودار طول فاصله $H...H$ در برابر انرژی پیوند هیدروژنی ۹۸
- شکل ۲-۳۳ نمودار طول فاصله $H...H$ در برابر انرژی پارامترهای توپولوژیکی ۹۹
- شکل ۲-۳۴ اثر استخلاف بر چگالی دانسیته اطراف هر اتم در ترکیبات استخلاف شده ۱۰۱
- شکل ۲-۳۵ نمودار E_{HB} در برابر شاخص δ_H ۱۰۲
- شکل ۲-۳۶ چرخش پیوند O-H حول پیوند C-O در ترکیب مالونالدهید ۱۰۳
- شکل ۲-۳۷ بررسی ثوابت استخلاف ۱۰۴
- شکل ۲-۳۸ بیانگر اثر رزونانسی در سیستم‌های 2-BET استخلاف شده در موقعیت R ۱۰۶
- شکل ۲-۳۹ نمایش جهت مهم‌ترین انتقالات در ترکیب 2-BET با استخلافات $COCH_3$ و F ۱۰۷
- شکل ۲-۴۰ نمودار انرژی اختلال مرتبه دوم در برابر انرژی پیوند هیدروژنی ۱۰۸
- شکل ۲-۴۱ نمودار انرژی اختلال مرتبه دوم در برابر دانسیته الکترونی $H...H$ ۱۰۸
- شکل ۳-۱ نمودار انرژی پیوند هیدروژنی در برابر طول پیوند $H...H$ در فاز محلول ۱۱۳
- شکل ۳-۲ نمودار فاصله $H...H$ در برابر ρ_{BCP} و $\nabla^2 \rho_{BCP}$ در فاز محلول ۱۱۴
- شکل ۳-۳ نمودار دانسیته الکترونی پیوند $H...H$ در برابر دانسیته الکترونی حلقه در فاز محلول ۱۱۴
- شکل ۳-۴ اثر استخلاف بر چگالی دانسیته اطراف هر اتم در ترکیبات استخلاف شده ۱۱۷

فهرست جداول

- ۱۱۹ جدول ۱-۲ پارامترهای ساختاری مربوط به 2-BET و مشتقاتش، در سطح B3LYP/6-311++G**
- ۱۲۰ جدول ۲-۲ داده های اسپکتروسکوپی مربوط به 2-BET و مشتقاتش، در سطح B3LYP/6-311++G**
- ۱۲۱ جدول ۳-۲ ثوابت استخلاف برای استخلافات مورد بررسی
- ۱۲۲ جدول ۴-۲ داده های توپولوژیکی و انرژی پیوند هیدروژنی ($KJ. mol^{-1}$) مربوط به 2-BET و مشتقاتش، در سطح B3LYP/6-311++G**
- ۱۲۳ جدول ۵-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی در پیوند هیدروژنی برای ترکیبات استخلاف شده
- ۱۲۴ جدول ۶-۲ انرژی HOMO، LUMO و Band Gap مربوط به 2-BET و مشتقاتش، در سطح B3LYP/6-311++G** در فاز گاز
- ۱۲۵ جدول ۷-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف H
- ۱۲۵ جدول ۸-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف F
- ۱۲۶ جدول ۹-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف NH_2
- ۱۲۷ جدول ۱۰-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف SCF_3
- ۱۲۸ جدول ۱۱-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف OH
- ۱۲۸ جدول ۱۲-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف Cl
- ۱۲۹ جدول ۱۳-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف Br
- ۱۲۹ جدول ۱۴-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف SH
- ۱۳۰ جدول ۱۵-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف $COCH_3$
- ۱۳۰ جدول ۱۶-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف C_2H_5
- ۱۳۱ جدول ۱۷-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف SCH_3
- ۱۳۱ جدول ۱۸-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف OCH_3
- ۱۳۲ جدول ۱۹-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف CH_2OH
- ۱۳۲ جدول ۲۰-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف CH_3
- ۱۳۳ جدول ۲۱-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف COH
- ۱۳۳ جدول ۲۲-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف $NHCH_3$
- ۱۳۴ جدول ۲۳-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف CN
- ۱۳۴ جدول ۲۴-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف CH_2Cl
- ۱۳۵ جدول ۲۵-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف CH_2OCH_3

- ۱۳۵ جدول ۲-۲۶ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف $NHCOCH_3$
- ۱۳۶ جدول ۲-۲۷ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف CH_2CF_3
- ۱۳۷ جدول ۲-۲۸ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف CF_3
- ۱۳۸ جدول ۲-۲۹ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف CH_2COOH
- ۱۳۹ جدول ۲-۳۰ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف $OCHF_2$
- ۱۳۹ جدول ۲-۳۱ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف CH_2F
- ۱۴۰ جدول ۲-۳۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای استخلاف NO_2
- ۱۴۱ جدول ۳-۱ پارامترهای ساختاری مربوط به 2-BET و مشتقاتش در سطح B3LYP/6-311++G** و مدل PCM
- ۱۴۲ جدول ۳-۲ پارامترهای توپولوژیکی مربوط به 2-BET و مشتقاتش در سطح B3LYP/6-311++G** و مدل PCM
- ۱۴۳ جدول ۳-۳ انرژی HOMO و LUMO و Band Gap مربوط به 2-BET و مشتقاتش، در سطح B3LYP/6-311++G** و مدل PCM

فصل اول

شیمی محاسباتی

۱-۱ مقدمه:

۱-۱-۱ تعریف:

شیمی فیزیک^۱ بخشی از علم شیمی است که در آن از اصول و قوانین فیزیکی، برای حل مسائل شیمیایی استفاده می‌شود. به عبارت دیگر، هدف از شیمی فیزیک، فراگیری اصول نظری فیزیک در توجیه پدیده‌های شیمیایی است. یک سیستم شیمیایی می‌تواند از هر دو دیدگاه میکروسکوپی و ماکروسکوپی مورد مطالعه قرار گیرد. دیدگاه میکروسکوپی بر پایه مفهوم مولکولی استوار است. در دیدگاه ماکروسکوپی خواص ماده در مقیاس بزرگ و بدون آن که مفهوم مولکول به‌صراحت به‌کار رود مطالعه می‌شود [۱]. شیمی فیزیک را می‌توان به چهار مبحث اصلی تقسیم کرد: ترمودینامیک^۲، شیمی کوانتومی^۳، مکانیک آماری^۴ و سینتیک^۵.

ترمودینامیک علم ماکروسکوپی است که روابط خواص تعادلی یک سیستم و تغییرات آن را مطالعه می‌کند. مولکول‌ها، الکترون‌ها و هسته‌هایی که آن‌ها را ساخته‌اند از مکانیک کلاسیک پیروی نمی‌کنند، در عوض حرکات آن‌ها از قوانین مکانیک کوانتومی تعیین می‌شود.

علم ماکروسکوپی ترمودینامیک نتیجه‌ای از رخدادها در سطح مولکولی (میکروسکوپی) است. سطوح مولکولی و ماکروسکوپی توسط شاخه‌ای از علم به نام مکانیک آماری به یکدیگر مرتبط می‌شوند. مکانیک آماری بینشی در خصوص اعتبار قوانین ترمودینامیک ایجاد می‌کند و امکان محاسبه خواص ماکروسکوپی ترمودینامیکی را از روی خواص مولکولی میسر می‌سازد.

۱-۱-۲ تاریخچه:

عبارت شیمی فیزیک توسط میخائیل لومونوسوف^۶ در سال ۱۷۵۲ ابداع شد، زمانی که او یک تحقیق با عنوان تحولی در شیمی فیزیک واقعی^۷ را در حضور دانشجویان دانشگاه پترزبورگ ارائه کرد.

^۱ Physical chemistry

^۲ Thermodynamics

^۳ Quantum chemistry

^۴ Statistical mechanics

^۵ kinetics

^۶ Mikhail Lomonosov

^۷ A Course in True Physical Chemistry