بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه بیرجند
دانشکده علوم

پایان‌نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

عنوان :

بررسی نظری اثرات فضایی، الکترون دهندگی و الکترون کشندگی گروه های استخلافی بر روی ساختار الکترونی طیف های ارتعاشی و NMR ترکیب ۴- سلنوکسو- بوت – ۲- انال و مطالعه صورت‌بندی‌های ۳- مرکاپتو- پروپن سلنال

استاد راهنما :
دکتر حیدر رئیسی

استاد مشاور :
دکتر محمد سعید حسینی

نگارش :
مریم شخم کار

شهریور ماه ۹۰

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

نگارش اندیشه ها سرمایه آینده است . . .

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

همسر عزیزم که راه تمام زندگیست ، دلخوشی همیشگیست . . .

پدر مهربانم که نمی دانم از بزرگی اش بگویم ، از مردانگی ، سخاوت یا از صبوری اش . . .

مادر مهربانم ، لطیف ترین گل بوستان ، که هستی من ز هستی اوست . . .

خواهر نازنینم، ملیحه جان ، همراه و دلسوز من در پیمودن این راه . . .

خواهران دوست داشتنیم ، مرضیه و مژگان عزیز ، که کمک و دعایشان همراه من است . . .

و در نهایت ، قشنگ ترین گل زندگی ام که در انتظار دیدن اولین لبخند او هستم . . .

تقدیم می نمایم.

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 جناب آقای دکتر حسینی ، بابت راهنمایی های صمیمانه ایشان.

از اساتید محترم جناب آقای دکتر حسین فرسی ودکتر علی نیک اختر به خاطر قبول زحمت فرمودن در تدوین این پایان نامه کمال سپاس و تشکر دارم.

از جناب آقای مهندس حاجی زاده که به عنوان نماینده تحصیلات تکمیلی در جلسه دفاعیه حضور داشتند سپاسگزارم.

خالصانه ترین سپاس ها را به همسر وخانواده عزیزم که در این راه همواره پشتیبان من بودند تقدیم می کنم.

در نهایت از دوست عزیزم خانم زهرا کمالی و فریبا ملانیا که کمک های بی پایان آنها همیشه همراه من است و تمام دوستان آزمایشگاه کمال تشکر رادارم.

چکیده

تمام صورت‌بندی‌های ممکن برای ترکیب ۳- مرکاپتو- پروپن سلنال (MCPS) در سطوح با B3LYP و MP2 **با** تابع پایه 6-311++G** و G2MP جهت تعیین ترتیب پایداری صورت‌بندی‌ها و امکان تشکیل پیوند هیدروژنی درون‌مولکولی مختلف در فاز گازی بهینه شده‌اند. همچنین، محاسبات برای تمام صورت-بندی‌های MCPS در سطح B3LYP و همان تابع پایه انجام شده است. افزایش نسبی مرتبه قدرت پیوند هیدروژنی برای سیستم‌های پیوند هیدروژنی نشان می‌دهد S-H…Se > Se-H…S می‌باشد و انرژی پیوند هیدروژنی برای این سیستم‌ها (MPS1 وSPT1) از روش شوستر و اسپینوزا به دست می‌آید. وجود پیوند هیدروژنی سبب افزایش عدم استقرار الکترون می‌گردد که پایداری ساختار MPS1 را افزایش می-دهد. به منظور مقایسه قدرت پیوند هیدروژنی، فرکانس‌های ارتعاشی پیوند S-H و Se-H، طیف‌بینی NMR، انرژی سطوح HOMO-LUMO و سد چرخشی برای MPS1 و SPT1 محاسبه شده‌اند. نقاط بحرانی و طبیعت پیوند هیدروژنی توسط تئوری اتم در مولکول بادر مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت . همچنین، از نظریه اوربیتال‌های پیوندی طبیعی برای فهم بهتر برهم‌کنش‌های بین‌مولکولی استفاده شد. در بخش دیگر، گروهی از سیستم‌هایی که ساختاری کیلیت با پیوند هیدروژنی C-H … Y (Y= Se، O و S) تشکیل می دهند، بررسی می‌شوند. پیوند هیدروژنی درون‌مولکولی برای مشتقات ۴- سلنوکسو-بوت- ۲- انال (SBE) در سطح B3LYP/6-311++G** مطالعه شده‌اند تا اثر استخلاف R بر روی ترکیب SBE مشخص گردد. مدل PCM برای تعیین اثر حلال استفاده شده است و خواص توپولوژیکی توزیع دانسیته الکترونی برای پل C-H…Se در روش اتم در مولکول بادر تجزیه و تحلیل می‌شوند. روش NBO، طیف‌بینی NMR و جابه‌جایی شیمیایی، به خوبی فرکانس‌های کششی، به منظور ارزیابی برهم‌کنش‌های پیوند هیدروژنی برای تمام مشتقات در همان سطح محاسبه شده‌اند. آروماتیسیته حلقه با چندین روش از قبیل شاخص HOMA، NICS و پارامتری که اخیرا برای توصیف آروماتیسیتی به کار می‌رود (FLUπ) محاسبه می‌شود. نتایج نشان می‌دهد، برای سیستم‌های دارای پیوند هیدروژنی ضعیف، با وجود پیوندهای مزدوج پیوند هیدروژنی کمک رزونانس نمی‌باشد. وجود چندین کانفورمر، امکان معرفی مولکول مرجع بدون پیوند هیدروژنی C-H … Y را می‌دهد. تمام پیوندهای هیدروژنی موجود در ساختارهای مورد بررسی پیوند جابه‌جایی آبی نامعمول می‌باشند.

در قسمت دیگر این رساله، مدل PCM برای بررسی اثر حلال بر روی استخلافات ترکیب SBE مورد استفاده قرار گرفته است. همچنین، محاسبات سدچرخشی برای چرخش حول زاویه H-C=O در ساختار و استخلاف‌هایش در دو فاز گاز و آب به کمک نظریه DFT ودر تابع پایه 6-311++G** مورد محاسبه قرار گرفت.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول : شیمی محاسباتی

۱-۱ مقدمه ۲

۱-۲ دلایل ظهور مکانیک کوانتومی ۲

۱-۲-۱ زمینه ظهور مکانیک کوانتومی ۳

۱-۲-۲ حوزه عمل مکانیک کوانتومی ۳

۱-۲-۳ دیدگاه اینشتین نسبت به مکانیک کوانتومی ۴

۱-۳ اصل عدم قطعیت هایزنبرگ ۴

۱-۴ معادله شرودینگر ۵

۱-۵ معادله شرودینگر غیرخطی ۶

۱-۶ معادله تابع موجی ۶

۱-۷ طبقه بندی روش های مختلف کوانتومی ۶

۱-۷-۱روش‌های سری آغازین ۷

۱-۱-۷-۱ تقریب هارتری- فاک ۷

۱-۱-۷-۲ همبستگی ۸

۱-۱-۷-۳ نظریه اختلال مولر- پلست ۹

۱-۷-۱-۴ بر هم کنش پیکربندی ۱۰
۱-۷-۱-۵ میدان خود سازگار چند پیکربندی ۱۱
۱-۷-۱-۶ خوشه جفت شده ۱۱
۱-۷-۱-۷ روش های مونت- کارلو کوانتوم ۱۲
۱-۷-۱-۸ تقریب بورن اپنهایمر ۱۲
۱-۷-۱-۹ ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی ۱۳
۱-۷-۱-۱۰ مجموعه پایه شکافت ظرفیت ۱۳
۱-۷-۱-۱۱ مجموعه پایه قطبشی ۱۳
۱-۷-۱-۱۲ مجموعه پایه نفوذی ۱۴
۱-۷-۲ روش های نیمه تجربی ۱۴
۱-۷-۲-۱ روش هوکل ۱۵
۱-۷-۲-۲ روش هوکل توسعه یافته ۱۵
۱-۷-۲-۳ روش PPP ۱۵
۱-۷-۲-۴ روش CNDO ۱۶
۱-۷-۲-۵ روش MINDO ۱۶
۱-۷-۲-۶ روش MNDO ۱۶
۱-۷-۲-۷ روش INDO ۱۷
۱-۷-۲-۸ روش ZINDO ۱۷
۱-۷-۲-۹ روش AM1 ۱۷

۱-۷-۲-۱۰ روش PM3 ۱۷

۱-۷-۲-۱۱ نظریه گوسین ۱۸

۱-۷-۳ نظریه تابعی چگالی ۱۸

۱-۷-۳-۱ نظریه پایه ۱۸

۱-۷-۳-۲ تکنیک های مقیاس خطی ۱۹

۱-۷-۳-۳ ملاحظات عملی ۱۹

۱-۸ تئوری اتم ها در مولکول ها ۲۰

۱-۸-۱ مقدمه ۲۰

۱-۸-۲ دانسیته الکترونی ۲۰

۱-۸-۳ فواصل دانسیته الکترونی از اتم ها در مولکو ل ها ۲۲

۱-۸-۱ دانسیته الکترونی در BCP (ρ_b) ۲۳

۱-۸-۵ لاپلاسین ($L(\Omega)$) ۲۳

۱-۹ نظریه اوربیتال‌های پیوندی طبیعی (NBO) ۲۴

۱-۹-۱ اوربیتال طبیعی (NO) ۲۴

۱-۹-۲ اوریتال های اتمی طبیعی NAO ۲۴

۱-۹-۳ اوربیتال های هیبریدی طبیعی NHO ۲۵

۱-۹-۴ محاسبه انرژی اختلال مرتبه دوم توسط NBO ۲۵

۱-۱۰ مدل PCM ۲۵

۱-۱۰-۱ مدل IPCM ۲۶

۲-۱۰-۱ مدل SCIPCM ۲۶

۲-۱۰-۳ مدل IEFPCM ۲۶

فصل دوم : بررسی اثر ساختاری بر روی ترکیب MCPS

۲-۱ مقدمه ۲۸

۲-۲ روش محاسبات ۲۹

۲-۳ بررسی ساختار مولکولی صورت بندی های مختلف ترکیب ۳- مرکاپتو پروپن سلنال ۳۰

۲-۴ گروه MPS (سلنال) ۳۱

۲-۵ گروه SPT (تیال) ۳۳

۲-۶ گروه ST (سلنوکسو-تیال) ۳۵

۲-۷ برررسی صورت بندی های دارای پیوند هیدروژنی ۳۶

۲-۷-۱ محاسبه شاخص ساختاری آروماتیسیته موضعی (HOMA) ۳۷

۲-۷-۲ محاسبه فرکانس ۳۸

۲-۷-۳ محاسبه جا به جایی شیمیایی ۳۹

۲-۷-۴ محاسبه اوربیتال های مولکولی ۳۹

۲-۷-۵ پتانسیل یونیزاسیون ۴۱

۲-۷-۶ محاسبه مسیر واکنش (IRC) ۴۱

۲-۷-۷ محاسبه انرژی سد چرخشی ۴۳

۲-۸ تجزیه و تحلیل AIM ۴۴

۲-۸-۱ بررسی AIM صورت‌بندی‌های فاقد پیوند هیدروژنی ۴۵

۲-۹ تجزیه و تحلیل NBO ۴۶

۲-۹-۱ تجزیه و تحلیل NBO برای صورت‌بندی‌های فاقد پیوند هیدروژنی ۴۷

۲-۱۰ بررسی صورت بندی های مختلف در فاز محلول ۴۸

۲-۱۰-۱ صورت‌بندی‌های MPS در محلول آبی ۴۹

۲-۱۰-۲ صورت‌بندی های SPT در محلول آبی ۵۰

۲-۱۰-۳ صورت‌بندی‌های ST در محلول آبی ۵۱

۲-۱۱ برررسی صورت‌بندی‌های دارای پیوند هیدروژنی در محلول آبی ۵۲

۲-۱۱-۱ محاسبات فرکانس ۵۲

۲-۱۱-۲ جابه‌جایی شیمیایی δ_H ۵۳

۲-۱۱-۳ ممان دایپل μ ۵۳

۲-۱۲ تجریه و تحلیل AIM ۵۴

۲-۱۲-۱ تجزیه و تحلیل AIM برای صورت‌بندی‌های فاقد پیوند هیدروژنی ۵۴

۲-۱۳ تجریه و تحلیل NBO ۵۵

۲-۱۳-۱ تجزیه و تحلیل NBO برای صورت‌بندی‌های فاقد پیوند هیدروژنی ۵۵

فصل سوم : بررسی پیوند هیدروژنی نامتعارف روی مشتقات مختلف ترکیب ۴- سلنوکسو-بوت-۲- انال (SBE)

۳-۱ مقدمه ۵۸

۳-۲ روش محاسبات و سیستم های مورد بررسی ۵۸

فصل چهارم : بررسی استخلافات مختلف ترکیب ۴- سلنوکسو-بوت-۲- انال (SBE) در فاز محلول و سد چرخشی در دو فاز گازی و محلول

۴-۱ مقدمه ۷۹

۴-۲ روش انجام محاسبات ۸۰

۴-۳ فاصله پیوند ۸۰

۴-۴ انرژی پیوند C-H…Se ۸۲

۴-۵ انرژی سد چرخشی ۸۶

فهرست اشکال

شکل ۱-۱ دو آرایش از الکترون های اطراف هسته در یک اتم (دارای احتمال یکسان در نظریه HF) ۸

شکل ۲-۱ نتیجه افزایش مرتبه محاسبات مولر- پلست ۹

شکل ۳-۱ تصویر برجسته دانسیته الکترونی در سطح حلقه آروماتیک ماکزیمم ها را در مکان هسته ۲۲

های کربن واکسیژن و نقاط ماکزیمم کمتری را در مکان هسته های هیدروژن نشان می دهد.

شکل ۴-۱ نقشه کانتوری دانسیته الکترونی در مولکول BF_3 ۲۳

شکل۱-۲ تعادلات تاتومری در ۳- مرکاپتو- پروپن سلنال ۲۹

شکل ۲-۲ صورت بندی های ۳- مرکاپتو- پروپن سلنال ۳۱

شکل۳-۲ صورت بندی های ۳- سلانیل- پروپن تیال ۳۳

شکل ۴-۲ صورت بندی های ۳- سلنوکسو- پروپان تیال ۲۹

شکل ۵-۲ رابطه انرژی شوستر برای ساختارهای دارای پیوند هیدروژنی ۳۷

شکل ۶-۲ اختلاف انرژی سطوح HOMO-LUMO برای کاننفرمرهای دارای IMHB ۴۰

شکل ۴-۲ صورت بندی های ۳- سلنوکسو- پروپان تیال ۲۹

شکل ۵-۲ رابطه انرژی شوستر برای ساختارهای دارای پیوند هیدروژنی ۳۷

شکل ۶-۲ اختلاف انرژی سطوح HOMO-LUMO برای کاننفرمرهای دارای IMHB ۴۰

شکل ۷-۲ مسیر واکنش انتقال پروتون در ساختارهای MPS1 وSPT1 ۴۲

شکل ۸-۲ برهم کنش های درون مولکولی برای دو ساختار MPS1 و SPT1 ۴۴

شکل ۹-۲ مسیر رزونانس در صورت بندی های MPS1 و SPT1 ۴۶

شکل ۱۰-۲ طرح کانتوری NBO، بیانگر برهم‌کنش موجود بین جفت الکترون‌های تنهای اتم‌های سولفور و سلنیوم با اوربیتال‌های ضدپیوندی Se-H و S-H به ترتیب در صورت-بندی‌های SPT1 وMPS1 ۴۷

شکل ۱-۳ صورت بندی های مختلف دارای پیوند و فاقد پیوند هیدروژنی ۵۹

شکل ۲-۳ نمایش اثر استخلافات کشنده و دهنده بر روی پیوند هیدروژنی ۶۰

شکل۳-۳ نمودار $\nabla^2\rho$ (Se…H) در برابر طول فاصله Se…H ۶۲

شکل۴-۳ نمودار ρ (Se…H) در برابر طول فاصله Se…H ۶۳

شکل ۵-۳ نمودار دانسیته پیوند Se…H در برابر دانسیته حلقه ۶۳

شکل ۶-۳ نمودار طول فاصله Se…H در برابر انرژی پیوند هیدروژنی ۶۴

شکل ۷-۳ نمودار طول فاصله Se…H در برابر انرژی پارامترهای توپولوژیکی ۶۵

شکل ۸-۳ اثر استخلاف بر چگالی دانسیته اطراف هر اتم در ترکیبات استخلاف شده ۶۷

شکل ۹-۳ نمودار E_{HB} در برابر شاخص δ_H ۶۸

شکل ۱۰-۳ چرخش پیوند O-H حول پیوند C-O در ترکیب مالونالدهید ۶۸

شکل ۱۱-۳ X مرکز واکنش‌پذیری و R استخلاف مورد نظر می‌باشد ۷۰

شکل ۱۲-۳ بیانگر اثر رزونانسی در سیستم‌های SBE استخلاف شده در موقعیت R ۷۰

شکل۱۳-۳ نمودار E_{HB} در برابر شاخص HOMA ۷۲

شکل۱۴-۳ نمودار E_{HB} در برابر شاخص FLU_{π} ۷۳

شکل۱۵-۳ نمودار FLU_{π} در برابر شاخص HOMA ۷۴

شکل۱۶-۳ نمودارNICS در برابر انرژی پیوند هیدروژنی ۷۵

شکل۱۷-۳ نمودار NICS در برابر شاخص HOMA ۷۵

شکل ۱۸-۳ نمایش جهت مهم‌ترین انتقالات در ترکیب SBE با استخلافات SCH_3 و H که به ترتیب دارای بیشترین و کمترین مقدار $E^{(2)}$ می باشند. ۷۶

شکل۱۹-۳ نمودار انرژی اختلال مرتبه دوم در برابر انرژی پیوندهیدروژنی ۷۷

شکل۲۰-۳ نمودار انرژی اختلال مرتبه دوم در برابر دانسیته الکترونی Se…H ۷۷

شکل ۱-۴ نمایش تعدادی از پیوندهای برون مولکولی و درون مولکولی در ترکیب SBE ۷۹

شکل ۲-۴ نمودار چرخش پیوند C-H حول C-C ۸۰

شکل۳-۴ نمودار انرژی پیوند هیدروژنی در برابر طول پیوند Se…H در فاز محلول ۸۲

شکل ۴-۴ نمودار فاصله Se ... H در برابر ρ_{BCP} و $\nabla^2\rho_{BCP}$ در فاز محلول ۸۳

شکل ۵-۴ نمودار دانسیته الکترونی پیوند Se…H در برابر دانسیته الکترونی حلقه در فاز محلول ۸۴

شکل ۶-۴ اثر استخلاف بر چگالی دانسیته اطراف هر اتم در ترکیبات استخلاف شده ۸۶

شکل ۷-۴ نمودار سد چرخشی استخلاف های مختلف SBE در فاز گازی ۹۰

شکل ۸-۴ نمودار سد چرخشی استخلاف های مختلف SBE در فاز محلول ۹۴

شکل ۹-۴ نمودار انرژی سد چرخشی بین دو فاز آب وگاز ۹۴

فهرست جداول

جدول ۱-۲ انرژی های نسبی محاسبه شده برای تمام صورت بندی های MCPS ۹۷

جدول ۲-۲ پارامترهای ساختاری و برخی پارامترهای مهم مربوط به حالت گذار و صورت بندی های MPS در فاز گازی (در جداول فاز گازی، مقادیر به ترتیب مربوط به سطوح B3LYP/6-311++G**، MP2/6-311++G** و G2MP2) ۹۸

جدول ۳-۲ پارامترهای ساختاری و برخی پارامترهای مهم مربوط به صورت بندی های SPT در فاز گازی ۹۸

جدول ۴-۲ پارامترهای ساختاری و برخی پارامترهای مهم مربوط به صورت بندی های ST در فاز گازی ۹۹

جدول ۵-۲ پارامترهای ترمودینامیکی مربوط به صورت بندی های MPS1، SPT1 و TS ۹۹

جدول ۶-۲ پارامترهای توپولوژیکی (ρ و$\nabla^2\rho$) برای صورت بندی های MPS، در فاز گازی و در سطح B3LYP/6-311++G** ۱۰۰

جدول ۷-۲ پارامترهای توپولوژیکی (ρ و$\nabla^2\rho$) برای صورت بندی های SPT ، در فاز گازی و در سطح B3LYP/6-311++G** ۱۰۰

جدول ۸-۲ پارامترهای توپولوژیکی (ρ و$\nabla^2\rho$) برای صورت بندی های ST ، در فاز گازی و در سطح B3LYP/6-311++G** ۱۰۱

جدول ۹-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-1 ۱۰۱

جدول ۱۰-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-2 ۱۰۱

جدول ۱۱-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-3 ۱۰۲

جدول ۱۲-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-4 ۱۰۲

جدول ۱۳-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-5 ۱۰۲

جدول ۱۴-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-6 ۱۰۳

جدول ۱۵-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-7 ۱۰۳

جدول ۱۶-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-8 ۱۰۴

جدول ۱۷-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب SPT-1 ۱۰۴

جدول ۱۸-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب SPT-2 ۱۰۵

جدول ۱۹-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب SPT-3 ۱۰۵

جدول ۲۰-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب SPT-4 ۱۰۶

جدول ۱۲-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب SPT-5 ۱۰۶

جدول ۲۲-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب SPT-6 ۱۰۶

جدول ۲۳-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب SPT-7 ۱۰۷

جدول ۲۴-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب SPT-8 ۱۰۷

جدول ۲۵-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب ST-2 ۱۰۸

جدول ۲۶-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب ST-3 ۱۰۸

جدول ۲۷-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب ST-4 ۱۰۸

جدول ۲۸-۲ انرژی های نسبی محاسبه شده برای تمام صورت بندی های MCPS ۱۰۹

جدول ۲۹-۲ پارامترهای ساختاری و برخی پارامترهای مهم مربوط به صورت بندی های MPS در فاز محلول، در سطح B3LYP/6-311++G** (در جداول فاز محلول، مقادیر به ترتیب مربوط به مربوط به مدل های PCM، IEF-PCM و SCI-PCM) ۱۱۰

جدول ۳۰-۲ پارامترهای ساختاری و برخی پارامترهای مهم مربوط به صورت بندی های SPT در فاز محلول، در سطح B3LYP/6-311++G** ۱۱۱

جدول ۳۱-۲ پارامترهای ساختاری و برخی پارامترهای مهم مربوط به صورت بندی های ST در فاز محلول، در سطح B3LYP/6-311++G** ۱۱۱

جدول ۳۲-۲ پارامترهای توپولوژیکی (ρ و$\nabla^2\rho$) برای صورت بندی های MPS در فاز محلول، در سطح B3LYP/6-311++G** و مدل PCM ۱۱۲

جدول ۳۳-۲ پارامترهای توپولوژیکی (ρ و$\nabla^2\rho$) برای صورت بندی های SPT در فاز محلول، در سطح B3LYP/6-311++G** و مدل PCM ۱۱۲

جدول ۳۴-۲ پارامترهای توپولوژیکی (ρ و$\nabla^2\rho$) برای صورت بندی های ST در فاز محلول، در سطح B3LYP/6-311++G** و مدل PCM ۱۱۳

جدول ۳۵-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-1 در فاز محلول ۱۱۳

جدول ۳۶-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-2 در فاز محلول ۱۱۳

جدول ۳۷-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-3 در فاز محلول ۱۱۴

جدول ۳۸-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-4 در فاز محلول ۱۱۴

جدول ۳۹-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-5 در فاز محلول ۱۱۴

جدول ۴۰-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-6 در فاز محلول ۱۱۵

جدول ۴۱-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-7 در فاز محلول ۱۱۵

جدول ۴۲-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب MPS-8 در فاز محلول ۱۱۵

جدول ۴۳-۲ مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای ترکیب SPT-1 در فاز محلول ۱۱۶