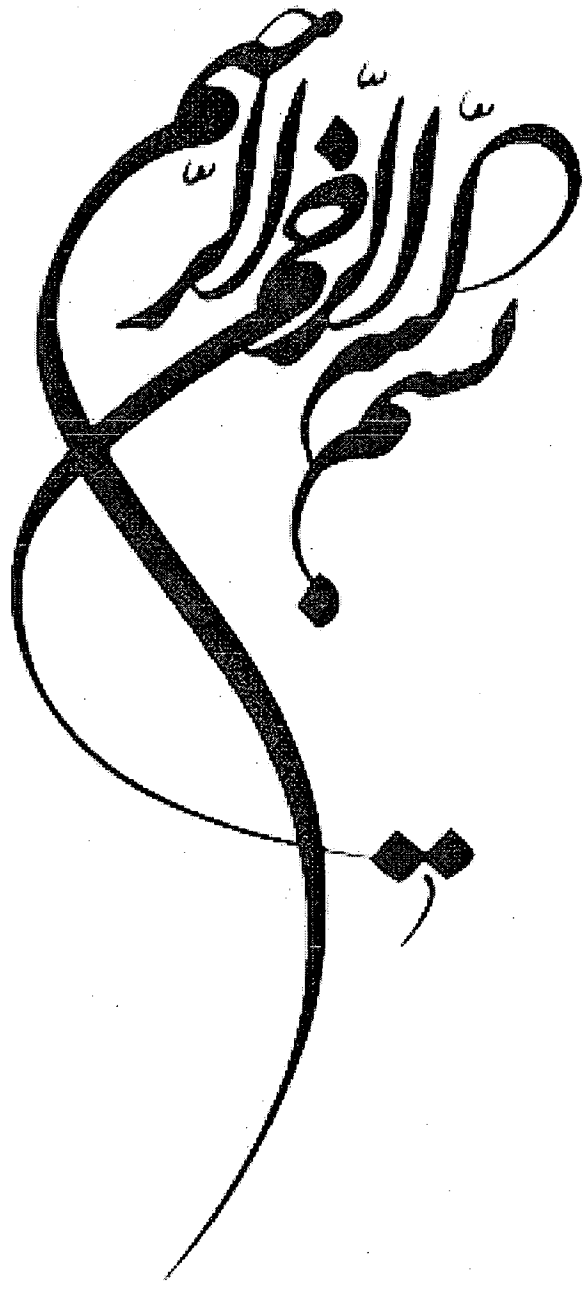

١٥٨٠٩٥

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشگاه علوم پایه، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد ((M.SC))

گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی پایداری و خواص ترمودینامیکی تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-اُن در فاز گازی و حلال با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتومی

استاد راهنما:

دکتر بهزاد چهکندی

استاد مشاور:

دکتر فرامرز طیاری

نگارش:

میثم کوثری

تابستان ۱۳۸۹

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
پژوهشگاه علوم و فناوری اطلاعات ایران
مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
IRANDOC

۱۵۸۰۹۵

۱۳۹۰/۳/ ۸

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه ، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد « M.Sc. »

گرایش : شیمی فیزیک

عنوان :

بررسی پایداری و خواص ترمودینامیکی تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و٤-اکسادیازول-۲-اُن در فاز گازی و حلال با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتومی

نگارش :

میثم کوثری

تابستان ۱۳۸۹

هیأت داوران :

۱ . دکتر بهزاد چهکندی

۲ . دکتر فرامرز طیاری

۳ . دکتر احسان زاهدی

٤. دکتر عبدالحکیم پنق

سپاس گذاری

نگارنده بر خود لازم می دانم از زحمات بی دریغ و راهنمایی های استاد محترم جناب **آقای دکتر بهزاد چهکندی** در راستای انجام این مجموعه تشکر و قدردانی نمایم.

هم چنین از زحمات استاد ارجمند جناب **آقای دکتر فرامرز طیاری** که با مشاوره های خود راهگشای اینجانب بوده اند کمال تشکر و سپاسگذاری را دارم.

در اخر لازم می دانم از همه **دوستان** که به نوعی یاری رسان بنده در این مجموعه بودند صمیمانه تشکر و قدردانی نمایم.

تقدیم به

پدر و مادر مهربانم که همواره در طول

حیات پر بارشان از حمایت های بی دریغ

آنها بهره مند بوده ام و تقدیم به

همه آنان که مرا علم آموختند.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

چکیده ۱

فصل اول:ساختمان حلقه های پنج عضوی هتروسیکل

۱-۱. مقدمه ۲

۱-۲. طبقه بندی ترکیبات هتروسیکل ۲

۱-۲-۱. هتروسیکل های غیر آروماتیک ۲

۱-۲-۲. هتروسیکل های آروماتیک ۳

۱-۳. هتروسیکل های پنج اتمی با شش الکترون π ۳

۱-۴. ترکیبات حلقوی پنج عضوی با یک اتم هترو ۵

۱-۵. فوران ها ۸

۱-۵-۱. سنتز حلقه فوران ۹

۱-۵-۲. واکنش با الکترون دوست ها ۱۱

۱-۵-۳. واکنش جانشینی رادیکالی و جانشینی هسته دوستی ۱۱

۱-۶ . ترکیبات حلقوی پنج عضوی با دو اتم هترو ۱۲

۱-۷. اکسازول ۱۴

۱-۷-۱. سنتز حلقه اکسازول ۱۵

۱-۷-۲. خواص شیمیایی اکسازول ها ۱۶

۱-۸ . اکسادیازول ۱۸

۱-۸-۱. سنتز حلقه اکسادیازول ۱۹
۱-۸-۲. خصوصیات شیمیایی اکسادیازول ها ۲۰
۱-۹. موارد استفاده ترکیبات هتروسیکل ۲۲

فصل دوم: مطالعات تئوری و تجربی

۲-۱. مطالعات تئوری و تجربی پیرامون ملکول های مشابه با ۵-آمینو-۴و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-اُن ۲۸

فصل سوم:روش های محاسبات کوانتومی

۳-۱. مقدمه ۵۱
۳-۲. روش های مدل سازی کامپیوتری ۵۱
۳-۳. روش مکانیک – ملکولی (MM) ۵۳
۳-۳-۱. چگونگی انجام یک محاسبه (MM) ۵۴
۳-۴. مکانیک کوانتومی ۵۵
۳-۵. تقریب بورن اُپنهایمر ۵۶
۳-۶. روش های نیمه تجربی ۵۷
۳-۶-۱. روش های تیمه تجربی برای ملکول های مزدوج ۵۸
۳-۶-۲. روش های نیمه تجربی عمومی ۵۹
۳-۶-۳. روش های اوربیتال ملکولی نیمه تجربی پیشرفتهMNDO ۶۰
۳-۷. روش آغازین ۶۱
۳-۷-۱. توابع موج SCF و هاتری –فاک ۶۲
۳-۷-۲. روش های Post-HF ۶۳

۳-۷-۲-۱. روش برهم کنش پیکربندی(CI) ۶۳
۳-۷-۲-۲. روش SCF چند پیکربندی(MC-SCF) ۶۴
۳-۷-۲-۳. نظریه اختلال MOller-plesset ۶۵
۳-۷-۲-۴. روش CC ۶۶
۳-۷-۳. مفهوم همبستگی الکترون ۶۶
۳-۸ . نظریه تابعی –دانسیته(DFT) ۶۷
۳-۸-۱. قضیه یHohenbery-kohn ۶۷
۳-۸-۲. روشKohn-sham ۶۸
۳-۸-۳. تابعی انرژی تعادلی – همبستگی E_{xc} ۷۰
۳-۸-۴. قابلیتDFT ۷۱
۳-۹. مجموعه ی پایه ۷۲
۳-۹-۱. اوربیتال های اسلیتری(STO) ۷۴
۳-۹-۲. مجموعه های پایه گوسی ۷۵
۳-۹-۲-۱. اوربیتال های گوسی منطبق (CGTO) ۷۵
۳-۹-۳. مجموعه های پایه مینیمال ۷۶
۳-۹-۴. مجموعه های پایه ظرفیت مجزا ۷۶
۳-۹-۵. مجموعه های پایه قطبیده ۷۷
۳-۹-۶. توابع پخش شده ۷۸
۳-۱۰. ترموشیمی در گوسین ۷۸
۳-۱۰-۱. انرژی الکترونی ۷۸
۳-۱۰-۲. انرژی ارتعاش ۷۹
۳-۱۰-۳. تصحیح انرژی کل ۷۹

۳-۱۰-۴. تصحیح گرمای انرژی داخلی ۷۹
۳-۱۰-۵. آنتالپی ۸۰
۳-۱۱. برنامه Gaussian ۸۰

فصل چهارم:نتایج محاسبات

۴-۱. مقدمه ۸۲
۴-۲. محاسبات در فاز گاز ۸۲
۴-۲-۱. انرژی و مقادیر ترمودینامیکی ۸۴
۴-۲-۲. ژئومتری های بهینه شده در فاز گازی ۹۱
۴-۳. محاسبات در فاز محلول ۹۷
۴-۳-۱. مقادیر ترمودینامیکی در فاز محلول ۹۷
۴-۳-۲. بررسی مقادیر E_0 توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در فاز گازی و حلال های مختلف ۱۳۵
۴-۳-۳. بررسی مقادیر ترمودینامیکی تعادل T_1 در حلال های مختلف ۱۴۱
۴-۳-۴. بررسی مقادیر ترمودینامیکی تعادل T_2 در حلال های مختلف ۱۴۷
۴-۳-۵. بررسی مقادیر ترمودینامیکی تعادل T_3 در حلال های مختلف ۱۵۳
۴-۳-۶. بررسی مقادیر ترمودینامیکی تعادل T_4 در حلال های مختلف ۱۵۹
۴-۳-۷. بررسی مقادیر ترمودینامیکی ΔE_0 برای تعادلات T_4,T_3,T_2,T_1 در حلال های مختلف ۱۶۵
۴-۳-۸. ژئومتری های بهینه شده در فاز محلول ۱۶۹
۴-۴. بحث و نتیجه گیری ۱۹۱

منابع و ماخذ

فهرست منابع غیر فارسی..... ۱۹۲

چکیده انگلیسی..... ۲۰۰

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول۲-۱. انرژی نسبی بر حسب کیلوکالری برمول وکلیه انرژی ها برای توتومرهای 2a-d..... ۳۰

جدول۲-۲. انرژی پایدار(در کیلو کالری بر مول) برای توتومرهای 3a-d..... ۳۵

جدول۲-۳. بازده محصولات واکنش سیلان 1a با آسیل کلریدها..... ۳۷

جدول۲-۴. سنتز۵-آسیل آمینو-۳هیدروژن-۱و۳و۴-تیادیازولین-۲-ان, ۱و۵-آسیل آمینو-۲-اتوکسی-۱و۳و۴-تیادیازولها ۴۴

جدول۲-۵. اطلاعات اسپکترا برای ۵-آسیل آمینو-۱و۳و۴- تیادیازولین-۲-ان, ۱و۵-آسیل آمینو-۲-اتوکسی-۱و۳و۴-تیادیازولها ۴۶

جدول۲-۶. انرژی نسبی و بارهای اتمی برای توتومرهای ۵- آمینو-۳هیدروژن-۱و۳و۴-تیادیازولین-۲-ان..... ۴۷

جدول۴-۱. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲ -ان در فاز گازی در سطح HF وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶ ..... ۸۵

جدول۴-۲. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲ -ان در فاز گازی در سطح B3LYP وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶ ..... ۸۶

جدول۴-۳. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲ -ان در فاز گازی در سطح MP_2 وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶ ..... ۸۷

جدول۴-۴. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو- ۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در فاز گازی در سطح HF و B3LYP وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶ ..... ۸۸

جدول۴-۵. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در فاز گازی در سطح HF وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶..... ۹۳

جدول۴-۶ . فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در فاز گازی در سطح B3LYP وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶..... ۹۴

جدول۴-۷. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در فاز گازی در سطح MP_2 وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶..... ۹۵

جدول۴-۸ . مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال آب در سطح HF وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶ ..... ۹۹

جدول۴-۹. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲-ان در حلال آب در سطح B3LYP وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶..... ۱۰۰

جدول۴-۱۰. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال آب در سطح MP_2 وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶..... ۱۰۱

جدول۴-۱۱. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال آب در سطحHF وB3LYP وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶..... ۱۰۲

جدول۴-۱۲. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲-ان در حلال متانول در سطح HF وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶..... ۱۰۵

جدول۴-۱۳. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال متانول در سطح B3LYP وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶..... ۱۰۶

جدول۴-۱۴. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال متانول در سطح MP_2 وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶..... ۱۰۷

جدول۴-۱۵. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال متانول در سطحHF وB3LYP وسری پایه ی G**++۳۱۱-۶..... ۱۰۸

جدول۴-۱۶. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲-ان در حلال استون در سطح HF وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۱۱

جدول۴-۱۷. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲-ان در حلال استون در سطح B3LYP وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۱۲

جدول۴-۱۸. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲-ان در حلال استون در سطح MP_2 وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۱۳

جدول۴-۱۹. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال استون در سطحHF وB3LYP وسری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۱۴

جدول۴-۲۰. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲-ان در حلال تترا هیدرو فوران در سطح HF وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۱۷

جدول۴-۲۱. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال تترا هیدرو فوران در سطح B3LYP وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۱۸

جدول۴-۲۲. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال تترا هیدرو فوران در سطح MP_2 وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۱۹

جدول۴-۲۳. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال تترا هیدرو فوران در سطحHF وB3LYP وسری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۲۰

جدول۴-۲۴. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال کلروفرم در سطح HF وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۲۳

جدول۴-۲۵. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال کلروفرم در سطح B3LYP وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۲۴

جدول۴-۲۶. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲-ان در

حلال کلروفرم در سطح MP_2 وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۲۵

جدول۴-۲۷. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال کلروفرم در سطحHF وB3LYP وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۲۶

جدول۴-۲۸. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲-ان در حلال سیکلو هگزان در سطح HF وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۲۹

جدول۴-۲۹. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال سیکلو هگزان در سطح B3LYP وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۳۰

جدول۴-۳۰. مقادیر ترمودینامیکی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول- ۲-ان در حلال سیکلو هگزان در سطح MP_2 وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۳۱

جدول۴-۳۱. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال سیکلو هگزان در سطحHF وB3LYP وسری پایه ی **G ++۳۱۱-۶..... ۱۳۲

جدول ۴-۳۲. تغییرات مقادیر E_0 برای توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴- اکسادیازول-۲-ان در فاز گازی و حلال در سطح HF وسری پایه ی**G++۳۱۱-۶..... ۱۳۷

جدول ۴-۳۳. تغییرات مقادیر E_0 برای توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴- اکسادیازول-۲-ان در فاز گازی و حلال در سطح B3LYP وسری پایه ی**G++۳۱۱-۶..... ۱۳۸

جدول ۴-۳۴. تغییرات مقادیر E_0 برای توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴- اکسادیازول-۲-ان در فاز گازی و حلال در سطح MP_2 وسری پایه ی**G++۳۱۱-۶..... ۱۳۹

جدول۴-۳۵. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل T_1از تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳- دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال های مختلف در سطح HF وسری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۴۲

جدول۴-۳۶. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل T_1 از تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳- دی

هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال های مختلف در سطح B3LYP وسری پایه ی
**G ++۳۱۱-۶..... ۱۴۳
جدول۴-۳۷. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل T_2 از تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳- دی
هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال های مختلف در سطح HF وسری پایه ی
**G ++۳۱۱-۶..... ۱۴۸
جدول۴-۳۸. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل T_2 از تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳- دی
هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال های مختلف در سطح B3LYP وسری پایه ی
**G++۳۱۱-۶..... ۱۴۹
جدول۴-۳۹. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل T_3 از تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳- دی
هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال های مختلف در سطح HF وسری پایه ی
**G++۳۱۱-۶..... ۱۵۴
جدول۴-۴۰. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل T_3 از تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳- دی
هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال های مختلف در سطح B3LYP وسری پایه ی
**G++۳۱۱-۶..... ۱۵۵
جدول۴-۴۱. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل T_4 از تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳- دی
هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال های مختلف در سطح HF وسری پایه ی
**G++۳۱۱-۶..... ۱۶۰
جدول۴-۴۲. مقادیر تغییرات توابع ترمودینامیکی تعادل T_4 از تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳- دی
هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-ان در حلال های مختلف در سطح B3LYP وسری پایه ی
**G++۳۱۱-۶..... ۱۶۱
جدول۴-۴۳. مقادیر تغییرات ΔE_0 در تعادلات توتومری ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴- اکسادیازول
-۲-ان در حلال های مختلف در سطح MP_2 وسری پایه ی**G++۳۱۱-۶..... ۱۶۶

جدول۴-۴۴. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال آب در سطح HF وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۷۱
جدول۴-۴۵. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال متانول در سطح HF وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۷۲
جدول۴-۴۶. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال استون در سطح HF وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۷۳
جدول۴-۴۷. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال تترا هیدرو فوران در سطح HF وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۷۴
جدول۴-۴۸. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال کلروفرم در سطح HF وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۷۵
جدول۴-۴۹. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال سیکلوهگزان در سطح HF وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۷۶
جدول۴-۵۰. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال آب در سطح B3LYP وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۷۷
جدول۴-۵۱. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال متانول در سطح B3LYP وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۷۸
جدول۴-۵۲. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال استون در سطح B3LYP وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۷۹
جدول۴-۵۳. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال تترا هیدرو فوران در سطح B3LYP وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۸۰
جدول۴-۵۴. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال کلروفرم در سطح B3LYP وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۸۱

جدول۴-۵۵. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال سیکلوهگزان در سطح B3LYP وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۸۲
جدول۴-۵۶. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال آب در سطح MP_2 وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۸۳
جدول۴-۵۷. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال متانول در سطح MP_2 وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۸۴
جدول۴-۵۸. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال استون در سطح MP_2 وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۸۵
جدول۴-۵۹. فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال تترا هیدرو فوران در سطح MP_2 وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۸۶
جدول۴-۶۰ . فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال کلروفرم در سطح MP_2 وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۸۷
جدول۴-۶۱ . فواصل و زوایای پیوندی توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-
ان در حلال سیکلوهگزان در سطح MP_2 وسری پایه ی**G ++۳۱۱-۶..... ۱۸۸

فهرست نمودارها

عنوان **صفحه**

نمودار۴-۱. تغییرات مقادیر ΔE برای تعادل T_1 در سطوح HF, B3LYP بر حسب ضریب دی الکتریک حلال با استفاده از سری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۴۵

نمودار۴-۲. تغییرات مقادیر ΔG برای تعادل T_1 در سطوح HF, B3LYP بر حسب ضریب دی الکتریک حلال با استفاده از سری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۴۶

نمودار۴-۳. تغییرات مقادیر ΔE برای تعادل T_2 در سطوح HF, B3LYP بر حسب ضریب دی الکتریک حلال با استفاده از سری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۵۱

نمودار۴-۴. تغییرات مقادیر ΔG برای تعادل T_2 در سطوح HF, B3LYP بر حسب ضریب دی الکتریک حلال با استفاده از سری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۵۲

نمودار۴-۵. تغییرات مقادیر ΔE برای تعادل T_3 در سطوح HF, B3LYP بر حسب ضریب دی الکتریک حلال با استفاده از سری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۵۷

نمودار۴-۶ . تغییرات مقادیر ΔG برای تعادل T_3 در سطوح HF, B3LYP بر حسب ضریب دی الکتریک حلال با استفاده از سری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۵۸

نمودار۴-۷. تغییرات مقادیر ΔE برای تعادل T_4 در سطوح HF, B3LYP بر حسب ضریب دی الکتریک حلال با استفاده از سری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۶۳

نمودار۴-۸ . تغییرات مقادیر ΔG برای تعادل T_4 در سطوح HF, B3LYP بر حسب ضریب دی الکتریک حلال با استفاده از سری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۶۴

نمودار۴-۹. تغییرات مقادیر ΔE_0 برای تعادلات T_4,T_3,T_2,T_1 در سطح MP_2 بر حسب ضریب دی الکتریک حلال با استفاده از سری پایه ی **G++۳۱۱-۶..... ۱۶۸

فهرست شکل ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱. ارائه ساختمان آنیون سیکلوپنتا دی ان (الف) و پیرول (ب)..... ۳

شکل۱-۲. تجمع الکترونی π ۲ برای پیرول ، فوران و تیوفن..... ۴

شکل ۱-۳. مثال هایی از هتروسیکل های پنج عضوی آروماتیک با دو یا بیش از دو هترواتم..... ۵

شکل ۱-۴..... ۵

شکل ۱-۵..... ۶

شکل ۱-۶..... ۶

شکل ۱-۷..... ۷

شکل ۱-۸..... ۷

شکل ۱-۹..... ۸

شکل ۱-۱۰. سنتز پال – نور فوران..... ۹

شکل ۱-۱۱..... ۹

شکل ۱-۱۲..... ۱۰

شکل ۱-۱۳. دو روش تهیه فوران ها با استخلاف ۲ و۳ ..... ۱۰

شکل ۱-۱۴. نیتره کردن فوران..... ۱۱

شکل ۱-۱۵. مثال هایی از جانشینی رادیکالی و هسته دوستی..... ۱۲

شکل ۱-۱۶..... ۱۲

شکل ۱-۱۷..... ۱۳

شکل ۱-۱۸..... ۱۳

شکل ۱-۱۹..... ۱۴

شکل ۱-۲۰. مثالی از سنتز اکسازول از ترکیبات آلفا – آسیل آمینو کربونیل واکنش گرها:

HCO_2CO_2Me (i) P_2O_5 (ii) ۱۵

شکل ۱-۲۱. ..... ۱۵

شکل ۱-۲۲. سنتز استرهای اکسازول و تیازول -۴- کربوکسیلیک ۱۶

شکل ۱-۲۳. بازشدن قابل برگشت ۲ – اکسازولیل لیتیوم ۱۶

شکل ۱-۲۴. افزایش اکسیژن یک تایی به اکسازول ها ۱۷

شکل ۱-۲۵. نوآرایی نوری ۴ – متیل – ۲ – فنیل اکسازول ۱۷

شکل ۱-۲۶. نوآرایی کنفورت($X=H, Cl, NR_2$ ،$Y=Cl, OR, O$) ۱۸

شکل ۱-۲۷. ..... ۱۸

شکل ۱-۲۸. چند روش عمومی برای تهیه اکسادیازول ها ۱۹

شکل ۱-۲۹. مثال هایی از باز شدن آنیونی حلقه ۲۰

شکل ۱-۳۰. باز شدن حلقه ۲ و ۵ – دی متیل – ۱ و ۳ و ۴ – اکسادیازول و حلقوی شدن مجدد ۲۱

شکل ۱-۳۱. یک مثال از تبدیل بین ملکولی حلقه ۲۱

شکل ۱-۳۲. واکنش های حرارتی ۱ و۲ و ۵ – اکسادیازول ۲ – اکسیدها ۲۲

شکل۱-۳۳. ..... ۲۳

شکل۱-۳۴. فوران ها به عنوان ترکیبات پنهان ۱ و ۴ –دی کربونیل ۲۳

شکل۱-۳۵. ..... ۲۴

شکل۱-۳۶. ..... ۲۵

شکل۱-۳۷. ..... ۲۶

شکل۱-۳۸. برخی از آنالوگ ها و نوکلئوزیدهای DNA که در داروها استفاده می شوند ۲۷

شکل۲-۱. ..... ۲۸

شکل ۲-۲. واکنش گر ها : i, BBr3, CH2Cl2, - 15°c , 6h; ii, RCOl ۲۹

شکل ۲-۳. طول پیوند های بهینه شده در Å با سطوح *HF/6-31G و *HF/3-21G..... ۳۰

شکل ۲-۴. روش سنتز برخی استخلافات ۴-(۵-استخلاف-۱و۳و۴-اکسادیازول -۲-ایل)

پریدین..... ۳۲

شکل ۲-۵..... ۳۳

شکل ۲-۶ . سنتز ۳-آمینو-۴هیدروژن-۱و۲و۴-اکسادیازولین-۵-ان..... ۳۳

شکل ۲-۷. طول پیوندهای بهینه شده در Å برای 3a-d در سطوح*HF/6-31G و

*HF/3-21G..... ۳۴

شکل ۲-۸..... ۳۶

شکل ۲-۹..... ۳۸

شکل ۲-۱۰. سنتز ترکیبات..... ۴۰

شکل ۲-۱۱. روش های سنتز ترکیبات3a-v..... ۴۱

شکل ۲-۱۲. سنتز ۵-آمینو-۳هیدروژن-۱و۳و۴-تیادیازولین-۲-ان ها..... ۴۳

شکل۲-۱۳. CNMR برای ۵-آمینو-۳هیدروژن-۱و۳و۴-تیادیازولین ها درDMSO..... ۴۵

شکل ۲-۱۴. طول پیوندها و زوایای بهینه شده برای توتومرهای ۵-آمینو-۳هیدروژن-۱و۳و۴-

تیادیازولین-۲-ان ها در سطح*6-31G..... ۴۸

شکل ۲-۱۵. یک روش برای سنتز ۲-آمینو-۵-[۴-تری فلورو اتوکسی -فنیل]-۱و۳و۴-

اکسادیازول ۴۹

شکل ۲-۱۶. روش دوم برای سنتز ۲-آمینو-۵-[۴-تری فلورو اتوکسی -فنیل]-۱و۳و۴-

اکسادیازول ۵۰

شکل ۴-۱. تعادلات توتومری برای توتومرهای ۵-آمینو-۲و۳-دی هیدرو-۱و۳و۴-اکسادیازول-۲-

اُن..... ۸۳