بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

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

گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

مطالعه و بررسی قدرت پیوند هیدروژنی و اثرات استخلاف در هیدروژن های α و β و اثر حلال بر روی تعادل توتومری ترکیب ۳-آمینو ۲-پروپن ۱- اون

استاد راهنما:

جناب آقای دکتر سیدجلال شخص امام پور

استاد مشاور:

جناب آقای دکتر جعفر ابولی

نگارش:

ترگل فرخی فرخانی

تابستان ۱۳۹۰

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود
دانشکده علوم پایه، گروه شیمی
پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد «M.Sc.»
گرایش: شیمی فیزیک

عنوان :

مطالعه و بررسی قدرت پیوند هیدروژنی و اثرات استخلاف در هیدروژن های α و β و اثر حلال بر روی تعادل توتومری ترکیب ۳-آمینو ۲-پروپن ۱- اون

نگارش :

ترگل فرخی فرخانی

تابستان ۱۳۹۰

هیأت داوران :

۱ . دکتر سید جلال شخص امام پور

۲ . دکتر جعفر ابولی

۳ . دکتر بهزاد چهکندی

۴. دکتر حسین نیکوفرد

بسمه تعالی

تعهد نامه اصالت رساله پایان نامه

اینجانب ...ترگل فرخی فرخانی.....دانش آموخته مقطع کارشناسی ارشد ناپیوسته / دکتری حرفه ای /دکترای تخصصی در رشته ....شیمی فیزیک.....که در تاریخ .....۹۰/۶/۳۱.....از پایان نامه خود تحت عنوان".....مطالعه و بررسی قدرت پیوند هیدروژنی و اثرات استخلاف در هیدروژنهای α و β و اثر حلال بر روی تعادل توتومری ترکیب ۳- آمینو ۲- پروپن ۱- اون ....." با کسب نمره..... و درجه ..... دفاع نموده ام بدین وسیله متعهد می شوم:

۱)این پایان نامه /رساله حاصل تحقیق و پژوهش انجام شده توسط اینجانب بوده و در مواردی که از دستاوردهای علمی و پژوهشی دیگران (اعم از پایان نامه ،کتاب،مقاله و...) استفاده نموده ام ،مطابق ضوابط و رویه موجود،نام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آن را در فهرست مربوطه ذکر و درج کرده ام.

۲)این پایان نامه/رساله قبلا برای دریافت هیچ مدرک تحصیلی (هم سطح،پایین تر یا بالاتر)در سایر دانشگاه ها و موسسات آموزش عالی ارائه نشده است.

۳)چنانچه بعد از فراغت تحصیل ،قصد استفاده و هر گونه بهره برداری اعم از چاپ کتاب ،ثبت اختراع و...از این پایان نامه داشته باشم،از حوزه معاونت پژوهشی واحد مجوزهای مربوطه را اخذ نمایم.

۴)چنانچه در هر مقطعی زمانی خلاف موارد فوق ثابت شود،عواقب ناشی از آن را می پذیرم و واحد دانشگاهی مجاز است با این جانب مطابق ضوابط و مقررات رفتار نموده و در صورت ابطال مدرک تحصیلی ام هیچگونه ادعایی نخواهم داشت.

نام و نام خانوادگی

امضاء و تاریخ

سپاسگزاری:

با تقدیر از اساتید فرهیخته و فرزانه که با نکته های دلاویز و گفته های بلند، صحیفه های سخن را علم پرور نمودند و همواره راه گشای من در اتمام واکمال پایان نامه بوده اند.

از استاد راهنمایم جناب آقای دکترسید جلال شخص امام پور که از هر گونه همکاری دریغ ننموده اند، تشکر نموده و کمال سپاس و قدردانی قلبی خود را به دلیل یاری‌ها و راهنمایی‌های بی چشمداشت ایشان که بسیاری از سختی‌ها را برایم آسان‌تر نمودند ابراز می دارم.

زحمات استاد مشاورم جناب آقای دکتر جعفر ابولی را ارج مینهم که با صبر و حوصله بسیار مرا در این مسیر هدایت فرمودند.

آنان استادانی هستند که با کرامتی چون خورشید، سرزمین دل را روشنی بخشیدند و گلشن سرای علم ودانش را با راهنمایی های کار ساز و سازنده بارور ساختند و در راه کسب علم و معرفت برای من آنچه در توان داشتند انجام دادند.

امیدوارم بتوانم در آینده جواب‌گوی این همه محبت آنها باشم ...

تقدیم به :

تقدیم با بوسه بر دستان پدرم
به او که نمی دانم از بزرگی اش بگویم یا مردانگی سخاوت، سکوت، مهربانی و .....
پدرم راه تمام زندگیست
پدرم دلخوشی همیشگیست

و به مادرم
دریای بی کران فداکاری و عشق که وجودم برایش همه رنج بود و وجودش برایم همه مهر

و خواهرم
که وجودش شادی بخش و صفایش مایه آرامش من و تکیه گاهم در مواجهه با مشکلات است

و برادرم
که همواره در طول تحصیل متحمل زحماتم بود وجودش مایه دلگرمی من می باشد

و مادر بزرگم
به پاس محبت های بی دریغشان که هرگز فروکش نمی کند

فهرست مطالب

عنوان صفحه

چکیده ۱

مقدمه ۲

فصل اول: پیوندهای هیدروژنی

۱-۱ . هدف ۳

۱-۲ . پیشینه تحقیق ۳

۱-۳ . تعریف پیوند هیدروژنی ۴

۱-۴ . طبقه‌بندی پیوند هیدروژنی ۵

۱-۴-۱ . پیوندهای هیدروژنی قوی ۵

۱-۴-۲ . پیوندهای هیدروژنی متوسط ۶

۱-۴-۳ . پیوندهای هیدروژنی ضعیف ۶

۱-۵ . طبقه‌بندی پیوند هیدروژنی براساس نوع تشکیل پیوند هیدروژنی ۶

۱-۵-۱ . پیوند هیدروژنی بین مولکولی ۶

۱-۵-۲ . پیوند هیدروژنی درون مولکولی ۷

۱-۶ . پیوندهای هیدروژنی برون مولکولی غیرعادی ۸

۱-۷ . پیوندهای هیدروژنی درون مولکولی دوتائی ۹

۱-۸ . پیوندهای هیدروژنی درون مولکولی شامل هالوژن ۹

۱-۹ . انتقال پروتون در پیوند هیدروژنی ۱۰

۱-۹-۱ . مکانیسم انتقال پروتون در تعادلات تاتومری در انول آمین ها ۱۱

۱-۱۰ . پیوند هیدروژنی و $OH\upsilon$ در محلول ۱۱

۱-۱۱ . روشهای مطالعه پیوندهای هیدروژنی ۱۲
۱ـ۱۱ـ۱ . روشهای ترمودینامیکی ۱۲
۱ـ۱۱ـ۲ . روشهای پراش ۱۲
۱ـ۱۱ـ۳ . طیف سنجی جذب الکترونی ۱۳
۱ـ۱۱ـ۴ . طیف بینی NMR ۱۴
۱ـ۱۱ـ۵ . طیف سنجی مادون قرمز ۱۴
۱ـ ۱۱ـ۶ . طیف بینی رامان ۱۵
۱ـ۱۲ . توابع انرژی پتانسیل در پیوند هیدروژنی ۱۵
۱ـ۱۲ـ۱ . توابع تک کمینه‌ای نامتقارن ۱۶
۱ـ۱۲ـ۲ . توابع دو کمینه‌ای نامتقارن ۱۶
۱ـ ۱۲ـ۳ . توابع دو کمینه متقارن ۱۷
۱ـ ۱۲ـ۴ . توابع تک کمینه متقارن ۱۷
۱ـ۱۳ . شواهد تجربی وجود پیوند هیدروژنی ۱۷
۱ـ۱۴ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی وتعادل تاتومری وعوامل موثر برآن در انول آمین ها ۱۸
۱ـ۱۴ـ۱ . درصد انول در حالت تعادل ۱۸
۱ـ۱۴ـ۱ـ۱ . اثرات حلال ۱۸
۱ـ۱۴ـ ۱ـ۲ . درجه حرارت ۱۹
۱ـ۱۴ـ۱ـ ۳ . اثر استخلاف در موقعیت α ۲۰
۱ـ۱۴ـ۱ـ۴ . دئوتره کردن ۲۰
۱-۱۵ . طیف HNMR انول آمین ها ۲۱
فصل دوم: شیمی محاسباتی
۲ـ۱ . مقدمه ۲۱
۲ـ۲ . طبقه‌بندی روش‌های کوانتومی ۲۲

۲ـ۳ . روشهای مکانیک مولکولی ۲۳
۲ـ۴ . روش‌های اصول اولیه ساختار الکترونی یا abinitio ۲۴
۲ـ۴ـ۱ . روش هارتری فاک..... ۲۵
۲ـ۵ . توابع پایه ۲۶
۲ـ۵ـ۱ . توابع اسلیتری ۲۷
۲ـ۵ـ۲ . توابع گوسینی ۲۷
۲ـ۵ـ۲ـ۱ . مجموعه‌های پایه کمینه ۲۸
۲ـ۵ـ۲ـ۲ . مجموعه‌های پایه شکافته ظرفیتی ۲۹
۲ـ۵ـ۲ـ۳ . مجموعه‌های پایه قطبشی ۲۹
۲ـ۵ـ۲ـ۴ . مجموعه پایه نفوذی ۳۰
۲ـ۶ . روشهای نیمه‌تجربی ۳۰
۲ـ۶ـ۱ . روش اوربیتال مولکولی هوکل..... ۳۱
۲ـ۷ . نظریه تابعی چگال(DFT)..... ۳۲
فصل سوم: مدل و روش های مورد استفاده
۳ ـ۱ . روش محاسبه ۳۳
۳ ـ۲ . روش کار و تحقیق ۳۴
۳ ـ۳ . روش تجزیه و تحلیل..... ۳۴
فصل چهارم: +نتایج و بحث
۴ ـ۱ . مقدمه ۳۵
۴ ـ۲ . ساختار مولکولی APO ۳۶
۴ ـ۳ . بررسی مولکول APO ۳۸
۴ ـ۳ ـ۱ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در مولکول APO از دیدگاه ساختار هندسی ۳۸
۴-۳-۲ . محاسبه انرژی الکترونی مولکول APO ۳۹

۴-۳-۳ . بررسی ترمودینامیکی تبدیل تاتومری [ketoimine ↔ enolamine] در مولکول APO و تاثیر حلال بر تعادل فوق ۴۰
۴-۳-۴ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی از دید طیف سنجی ارتعاشی در مولکول APO ۴۱
۴-۳ . بررسی استخلافات فلوئوره ۴۱
۴-۳-۱ . بررسی استخلاف های فرم های (F.APO) از نظر ساختار هندسی ۴۳
۴-۳-۲ . بررسی ترمودینامیکی تعادل تاتومری ۴ گونه استخلاف فلوئوره شدهAPO و اثر حلال بر آنها ۴۶
۴-۳-۳ . بررسی حرکات ارتعاشی استخلاف های فلوئور شدهAPO ۴۸
۴-۴ . بررسی استخلافات کلره ۴۹
۴-۴-۱ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی با توجه به ساختار هندسی در مشتقات کلره شده APO ۵۱
۴-۴-۲ . بررسی ترمودینامیکی تعادل تاتومری ۴ گونه استخلاف کلره شده**APO** و اثر حلال بر آنها ۵۴
۴-۴-۳ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی از نظر طیف سنجی ارتعاشی در ۴ استخلاف کلره شده APO ۵۶
۴-۵ . بررسی استخلافات Br.APO ۵۷
۴-۵-۱ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی استخلافات Br.APO ازدیدگاه ساختاری ۵۹
۴-۵-۲ . بررسی پارامترهای ترمودینامیکی ۴ استخلاف برمو APO و تأثیر قطبیت حلال بر تعادل تاتومری شدن هر استخلاف ۶۲
۴-۵-۳ . بررسی ارتعاشی استخلاف های (Br.APO) به وسیله طیف سنجی ۶۴
۴-۶ . بررسی استخلاف متیله ۶۴
۴-۶-۲ . بررسی اثر قطبیت حلال بر تعادل تاتومری (Keto→Enol) در مشتقات متیله مولکول APO ۶۹
۴-۶-۳ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی از دیدگاه طیف سنجی ارتعاشی برای استخلافات متیل APO ۷۲
۴-۷ . بررسی استخلافات سیانوره ۷۳
۴-۷ -۱ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در استخلاف های سیانوره مولکول APO با توجه به ساختار هندسی ۷۴
۴-۷-۲ . بررسی اثر قطبیت حلال بر مشتقات سیانوره APO ۷۸
۴-۷-۳ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در استخلافات سیانوره APO از دیدگاه طیف سنجی ارتعاشی ۸۰

۴-۸ . بررسی استخلافات آمینه NH_2 ..... ۸۱
۴-۸ . بررسی استخلافات آمینه NH_2 ..... ۸۳
۴-۸-۱ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در استخلافات آمینه مولکول APO از دیدگاه ساختار ۸۳
۴-۸-۲ . بررسی اثر قطبیت حلال بر تعادل ترمودینامیکی [Ketoimine↔Enolamine] مشتقات آمینه مولکول APO ۸۶
۴-۸-۳ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در مشتقات آمینه مولکول APO از دیدگاه طیف سنجی ارتعاشی ۸۹
۴-۹ . بررسی استخلافات هیدروکسیله ۸۹
۴-۹- ۱ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در مشتقات هیدروکسیله APO از دیدگاه ساختار هندسی ۹۱
۴-۹-۲ . بررسی اثر حلال بر تعادل تاترمری [Ketoimine↔Enolamine] در مشتقات هیدروکسیله APO ۹۴
۴-۹-۳ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در مشتقات هیدروکسیله APO از دیدگاه طیف سنجی ارتعاشی..... ۹۷
۴-۱۰ . بررسی استخلافات فنیله ۹۸
۴-۱۰-۱ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در مشتقات فنیله APO با توجه به ساختار هندسی ۹۹
۴-۱۰-۲ . بررسی اثر قطبیت حلال بر تعادل تاتومری در استخلاف فنیله شده APO ۱۰۲
۴-۱۰-۳ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در استخلافات فنیله مولکول APO به روش طیف سنجی ارتعاشی.... ۱۰۴
۴-۱۱ . بررسی استخلافات مرکاپتانه ۱۰۵
۴-۱۱-۱ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در استخلافات مرکاپتانه (SH-APO) از دیدگاه ساختار هندسی..... ۱۰۷
۴-۱۱-۲ . بررسی اثر قطبیتی حلال بر تعادل تاتومری ۱۱۰
۴-۱۱-۳ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در مشتقات مرکاپتانه APO (SH-APO) به وسیله طیف سنجی ارتعاشی..... ۱۱۲
۴-۱۲ . بررسی استخلافات متیل مرکاپتانه..... ۱۱۳
۴-۱۲-۱ . بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در استخلاف SMe متیل مرکاپتانه مولکول APO از دیدگاه ساختار هندسی ۱۱۵

۴-۱۲-۲ . بررسی تعادل تاتومری شدن در مشتقات متیل مرکاپتانه APO (SMe-APO) و تاثیر قطبیت حلال بر درصد انولی شدن مولکول های زیر ۱۱۸
۴-۱۲-۳ . بررسی ارتعاشی استخلافات متیل مرکاپتانه APO (SMe-APO) به وسیله طیف سنجی ارتعاشی . ۱۲۰
۴-۱۳ . بررسی استخلافات سالیسیله ۱۲۱
۴-۱۳-۱ . بررسی استخلاف های فرم های SiH_3 در مولکول APO از نظر ساختار هندسی و بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در این چهار جفت ۱۲۲
۴-۱۳-۲ . بررسی تعادل تاتومری شدن در مشتقات سالیسیلهAPO (SiH_3-APO) و تاثیر قطبیت حلال بر درصد انولی شدن ۱۲۵
۴-۱۳-۳ . بررسی ارتعاشی استخلافات (SiH_3-APO) به وسیله طیف سنجی ارتعاشی ۱۲۷
نتیجه گیری و پیشنهادات
نتیجه گیری ۱۲۹
پیشنهادات ۱۳۰
پیوست ها
پ-۱ . شکل : ساختار فضایی مولکول APO ۱۳۱
پ-۲ . شکل : ساختار فضایی ۳-Me-APO ۱۳۱
پ-۳ . شکل : ساختار فضایی Alpha-Me-APO..... ۱۳۱
پ-۴ . شکل : ساختار فضایی N-Me-APO..... ۱۳۱
پ-۵ . شکل : ساختار فضایی O-Me-APO..... ۱۳۱
پ-۶ . شکل : ساختار فضایی ۳-F-APO ۱۳۲
پ-۷ . شکل : ساختار فضایی Alpha-F-APO ۱۳۲
پ-۸ . شکل : ساختار فضایی N-F-APO..... ۱۳۲
پ-۹ . شکل : ساختار فضایی O-F-APO ۱۳۲
پ-۱۰ . شکل : ساختار فضایی ۳-Cl-APO..... ۱۳۳

پ-۱۱ . شکل : ساختار فضایی Alpha-Cl-APO ۱۳۳
پ-۱۲ . شکل : ساختار فضایی N-Cl-APO ۱۳۳
پ-۱۳ . شکل : ساختار فضایی O-Cl-APO ۱۳۳
پ-۱۴ . شکل : ساختار فضایی ۳-Br-APO ۱۳۴
پ-۱۵ . شکل : استخلاف Alpha-Br-APO ۱۳۴
پ-۱۶ . شکل : استخلاف N-Br-APO ۱۳۴
پ-۱۷ . شکل : استخلاف O-Br-APO ۱۳۴
پ-۱۸ . شکل : استخلاف ۳-OH-APO ۱۳۵
پ-۱۹ . شکل : استخلاف Alpha-OH-APO ۱۳۵
پ-۲۰ . شکل : استخلاف N-OH-APO ۱۳۵
پ-۲۱ . شکل : استخلاف O-OH-APO ۱۳۵
پ-۲۲ . شکل : استخلاف ۳-Ph-APO ۱۳۶
پ-۲۳ . شکل : استخلاف Alpha-Ph-APO ۱۳۶
پ-۲۴ . شکل : استخلاف N-Ph-APO ۱۳۶
پ-۲۵ . شکل : استخلاف O-Ph-APO ۱۳۶
پ-۲۶ . شکل : استخلاف ۳-SH-APO ۱۳۷
پ-۲۷ . شکل : استخلاف Alpha-SH-APO ۱۳۷
پ-۲۸ . شکل : استخلاف N-SH-APO ۱۳۷
پ-۲۹ . شکل : استخلاف O-SH-APO ۱۳۷
پ-۳۰ . شکل : استخلاف ۳-CN-APO ۱۳۸
پ-۳۱ . شکل : استخلاف Alpha-CN-APO ۱۳۸
پ-۳۲ . شکل : استخلاف N-CN-APO ۱۳۸
پ-۳۳ . شکل : استخلاف O-CN-APO ۱۳۸

پ-۳۴ . شکل : استخلاف ۳-SMe-APO ۱۳۹
پ-۳۵ . شکل : استخلاف Alpha-SMe-APO..... ۱۳۹
پ-۳۶ . شکل : استخلاف N-SMe-APO..... ۱۳۹
پ-۳۷ . شکل : استخلاف O-SMe-APO..... ۱۳۹
پ-۳۸ . شکل : استخلاف ۳-NH_2-APO..... ۱۴۰
پ-۳۹ . شکل : استخلاف Alpha- NH_2-APO ۱۴۰
پ-۴۰ . شکل : استخلاف N- NH_2-APO..... ۱۴۰
پ-۴۱ . شکل : استخلاف O- NH_2-APO ۱۴۰
پ-۴۲ . شکل : استخلاف ۳-SiH_3-APO..... ۱۴۱
پ-۴۳ . شکل : استخلاف Alpha- SiH_3-APO..... ۱۴۱
پ-۴۴ . شکل : استخلاف N- SiH_3-APO..... ۱۴۱
پ-۴۵ . شکل : استخلاف O- SiH_3-APO..... ۱۴۱
منابع و مآخذ
فهرست منابع..... ۱۴۲
چکیده انگلیسی ۱۴۷

فهرست اشکال

عنوان صفحه

۱-۱ . شکل : پیوندهای هیدروژنی بین مولکولی در چند سیستم مختلف ۷

۱-۲ . شکل : پیوندهای هیدروژنی غیر معمول در چند سیستم مختلف ۸

۱-۳ . شکل : پیوند هیدروژنی درون مولکولی چند تائی در ۳ اسید آمینه ۹

۱-۴ . شکل : پیوند هیدروژنی درون مولکولی شامل هالوژن ۹

۱-۵ . شکل : نمایش تغییرات توابع پتانسیل و ترازهای انرژی از دو کمینه‌ای متقارن (چپ) تا تک کمینه‌ای متقارن (راست) ۱۶

۴-۱ . شکل : ساختار مولکولی APO ۳۶

۴-۲ . شکل : ساختار مولکولی کتو ایمین ۳۶

۴-۳ . شکل : ساختار مولکولی انول آمین ۳۷

۴-۴ . شکل : بررسی تعادلات تاتومری در انول آمین ها ۳۷

۴-۵ . شکل : ساختار مولکولی ۳-APO-F ۴۱

۴-۶ . شکل : ساختار مولکولی α -APO-F ۴۲

۴-۷ . شکل : ساختار مولکولی N -APO-F ۴۲

۴-۸ . شکل : ساختار مولکولی O -APO-F ۴۲

۴-۹ . شکل : ساختار مولکولی ۳ -Cl -APO ۴۹

۴-۱۰ . شکل : ساختار مولکولی α -Cl -APO ۴۹

۴-۱۱ . شکل : ساختار مولکولی N - Cl -APO ۵۰

۴-۱۲ . شکل : ساختار مولکولی O - Cl -APO ۵۰

۴-۱۳ . شکل : ساختار مولکولی ۳ - Br -APO ۵۷

۴-۱۴ . شکل : ساختار مولکولی α - Br -APO ۵۷

۴-۱۵ . شکل : ساختار مولکولی N - Br -APO ۵۸

۴–۱۶ . شکل : ساختار مولکولی O - Br -APO ۵۸
۴–۱۷ . شکل : ساختار مولکولی ۳- Br -APO ۶۴
۴–۱۸ . شکل : ساختار مولکولی α - Br -APO ۶۵
۴–۱۹ . شکل : ساختار مولکولی N - Br -APO ۶۵
۴–۲۰ . شکل : ساختار مولکولی O - Br -APO ۶۵
۴–۲۱ . شکل : ساختار مولکولی ۳- CN-APO ۷۳
۴–۲۲ . شکل : ساختار مولکولی α - CN -APO ۷۳
۴–۲۳ . شکل : ساختار مولکولی N - CN -APO ۷۳
۴–۲۴ . شکل : ساختار مولکولی O - CN -APO ۷۳
۴–۲۵ . شکل : ساختار مولکولی ۳- NH_2 -APO ۸۱
۴–۲۶ . شکل : ساختار مولکولی α - NH_2 -APO ۸۲
۴–۲۷ . شکل : ساختار مولکولی N - NH_2 -APO ۸۲
۴–۲۸ . شکل : ساختار مولکولی O - NH_2 -APO ۸۲
۴–۲۹ . شکل : ساختار مولکولی ۳ -OH -APO ۸۹
۴–۳۰ . شکل : ساختار مولکولی α - OH -APO ۹۰
۴–۳۱ . شکل : ساختار مولکولی N - OH -APO ۹۰
۴–۳۲ . شکل : ساختار مولکولی O - OH -APO ۹۰
۴–۳۳ . شکل : ساختار مولکولی ۳ -Ph-APO ۹۸
۴–۳۴ . شکل : ساختار مولکولی α -Ph-APO ۹۸
۴–۳۵ . شکل : ساختار مولکولی N -Ph-APO ۹۸
۴–۳۶ . شکل : ساختار مولکولی O -Ph-APO ۹۸
۴–۳۷ . شکل : ساختار مولکولی ۳ -SH-APO ۱۰۵
۴–۳۸ . شکل : ساختار مولکولی α - SH -APO ۱۰۶

۴–۳۹ . شکل : ساختار مولکولی N - SH -APO ۱۰۶
۴–۴۰ . شکل : ساختار مولکولی O - SH -APO ۱۰۶
۴–۴۱ . شکل : ساختار مولکولی $SMe-APO-^{3}$ ۱۱۳
۴–۴۲ . شکل : ساختار مولکولی α -SMe -APO ۱۱۳
۴–۴۳ . شکل : ساختار مولکولی N -SMe -APO ۱۱۴
۴–۴۴ . شکل : ساختار مولکولی O-SMe -APO ۱۱۴
۴–۴۵ . شکل : ساختار مولکولی SiH_3-APO-^{3} ۱۲۱
۴–۴۶ . شکل : ساختار مولکولی α - SiH_3 -APO ۱۲۱
۴–۴۷ . شکل : ساختار مولکولی N - SiH_3 -APO ۱۲۱
۴–۴۸ . شکل : ساختار مولکولی O - SiH_3 -APO ۱۲۱

فهرست جداول

عنوان صفحه

۱-۱ . جدول : مقادیرانرژی barrierOH و NO_2 ..... ۱۱

۱-۲ . جدول : تغییرات درصد انولی در حالت تعادل با حلال و جابه جایی شیمیایی پروتون انولی، δ(OH) برابرAA.. ۱۹

۱-۳ . جدول : اثر درجه حرارت بر روی تعادل Keto ↔ Enol برای AA و D_2AA ۲۰

۱-۴ . جدول : اثر استخلافات α بر روی درصد تاتومر در ترکیب استیل استون ۲۰

۴-۱ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی در مولکول APO ۳۸

۴-۲ . جدول : محاسبه انرژی الکترونی مولکول APO ۳۹

۴-۳ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل [keto↔enol] در مولکول APO ۴۰

۴-۴ . جدول : بررسی حرکات ارتعاشی در مولکول APO ۴۱

۴-۵ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف فلوئوره شده ۴۳

۴-۶ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف F-APO در پایدارترین حالت ۴۵

۴-۷ . جدول : بررسی اثر حلال در استخلاف ۳-F-APO ۴۶

۴-۸ . جدول : بررسی اثر حلال در استخلاف Alpha-F-APO ۴۷

۴-۹ . جدول : بررسی اثر حلال در استخلاف N-F-AP ۴۷

۴-۱۰ . جدول : بررسی اثر حلال در استخلاف O-F-APO ۴۷

۴-۱۱ . جدول : بررسی فرکانس های ارتعاشی استخلاف فلوئور ۴۸

۴-۱۲ . جدول : بررسی ساختار فرم انولی ۴ استخلاف Cl.APO ۵۱

۴-۱۳ . جدول : بررسی ساختار فرم انولی ۴ استخلاف Cl.APO در پایدارترین حالت ۵۳

۴-۱۴ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری در ۳-Cl-APO ۵۴

۴-۱۵ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری در Alpha-Cl-APO ۵۴

۴-۱۶ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری درN-Cl-APO ۵۵

۴-۱۷ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری درO-Cl-APO ۵۵

۴-۱۸ . جدول : بررسی ارتعاشات ۴ استخلاف کلره شده APO ۵۶
۴-۱۹ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف Br. APO ۵۹
۴-۲۰ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف در پایدارترین حالت ۶۱
۴-۲۱ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری در مولکول ۳-Br-APO ۶۲
۴-۲۲ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری در مولکول Alpha-Br-APO ۶۲
۴-۲۳ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری در مولکول N-Br-APO ۶۳
۴-۲۴ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری در مولکول O-Br-APO ۶۳
۴-۲۵ . جدول : بررسی حرکات ارتعاشی در استخلاف Br.APO ۶۴
۴-۲۶ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف Me.APO ۶۶
۴-۲۷ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف Me.APO در پایدارترین حالت ۶۸
۴-۲۸ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری در استخلاف ۳-Me-APO ۶۹
۴-۲۹ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری در استخلاف Alpha -Me-APO ۷۰
۴-۳۰ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری در استخلاف N -Me-APO ۷۰
۴-۳۱ . جدول : بررسی اثر حلال بر تعادل تاتومری در استخلاف O-Me-APO ۷۰
۴-۳۲ . جدول : بررسی حرکات ارتعاشی در مولکول متیل ۷۲
۴-۳۳ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرمول انولی ۴ استخلافCN.APO ۷۴
۴-۳۴ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرمول انولی ۴ استخلافCN.APO در پایدارترین حالت ۷۶
۴-۳۵ جدول : بررسی اثر حلال در مولکول ۳-CN-APO ۷۸
۴-۳۶ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکولAlpha-CN-APO ۷۸
۴-۳۷ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکولN-CN-APO ۷۸
۴-۳۸ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکولO-CN-APO ۷۹
۴-۳۹ . جدول : بررسی حرکات ارتعاشی در مولکول سیانور ۸۰
۴-۴۰ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف NH_2.APO ۸۳

۴-۴۱ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف NH_2.APO در پایدارترین حالت ۸۵
۴-۴۲ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول ۳-NH_2-APO ۸۶
۴-۴۳ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول Alpha -NH_2-APO ۸۷
۴-۴۴ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول N -NH_2-APO ۸۷
۴-۴۵ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول O -NH_2-APO ۸۷
۴-۴۶ . جدول : بررسی حرکت ارتعاشی در مولکول NH_2 ..... ۸۹
۴-۴۷ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف OH.APO ۹۱
۴-۴۸ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف OH.APO در پایدارترین حالت ۹۳
۴-۴۹ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول ۳-OH-APO ۹۴
۴-۵۰ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول Alpha -OH-APO ۹۵
۴-۵۱ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول N-OH-APO ۹۵
۴-۵۲ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول O-OH-APO ۹۵
۴-۵۳ . جدول : بررسی حرکات ارتعاشی در مولکول OH ۹۷
۴-۵۴ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف Ph. APO ۹۹
۴-۵۵ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف Ph.APOدر پایدارترین حالت ۱۰۱
۴-۵۶ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول ۳-Ph-APO ۱۰۲
۴-۵۷ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول Alpha -Ph-APO ۱۰۳
۴-۵۸ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول N-Ph-APO ۱۰۳
۴-۵۹ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول O-Ph-APO ۱۰۳
۴-۶۰ . جدول : بررسی حرکات ارتعاشی در مولکول Ph ۱۰۴
۴-۶۱ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف SH.APO ۱۰۷
۴-۶۲ . جدول : بررسی ساختار هندسی فرم انولی ۴ استخلاف SH.APO در پایدارترین حالت ۱۰۹
۴-۶۳ . جدول : بررسی اثر حلال در مولکول ۳-SH-APO ۱۱۱