بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه بیرجند

دانشکده علوم

گروه شیمی

عنوان پایان نامه:

بررسی اثر استخلاف بر روی قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی و رزونانس در ترکیب (Z)-۲- هیدروکسی سایلیلین استالدئید و مطالعه صورت بندی های این ترکیب

استاد راهنما:

دکتر حیدر رئیسی

استاد مشاور:

مهدی یوسفیان

نگارش:

دانیال لقمانی نژاد

تابستان ۹۰

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

دانشگاه شهید بهشتی
مدیریت تحصیلات تکمیلی

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

فرم شماره ۱۰

با تأییدات خداوند متعال جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی کارشناسی ارشد آقای **دانیال لقمانی نژاد** دانشجوی کارشناسی ارشد رشته: **شیمی** به شماره دانشجویی: **۸۸۱۳۱۲۷۰۱۶** گرایش: **شیمی فیزیک** دانشکده: **علوم**

تحت عنوان : " **بررسی اثر استخلاف برروی قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی و رزونانس در ترکیب (Z)-۲ هیدروکسی سیلیلن استالدئید و مطالعه صورت بندی های این ترکیب** "

به ارزش: **۶** واحد درساعت: **۱۰ صبح** روز : **سه شنبه** مورخ : **۹۰/۶/۱**

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	**آقای دکتر حیدر رئیسی**	**دانشیار**	
استاد راهنمای دوم			
استاد مشاور اول	**آقای مهدی یوسفیان**	**دانشجوی دکترا**	
استاد مشاور دوم			
داور اول	**آقای دکترحسین فرسی**	**استادیار**	
داور دوم	**آقای دکتر علی نیک اختر**	**استادیار**	
نماینده تحصیلات تکمیلی	**آقای دکتر محمدعلی ناصری**	**استادیار**	

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: ۱۹/۸۰) ☐ دفاع مجدد ☐ غیرقابل قبول

۱- عالی (۲۰-۱۹) ۲- بسیار خوب (۱۸/۹۹ – ۱۸) ۳- خوب (۱۷/۹۹ – ۱۶) ۴- قابل قبول (۱۵/۹۹ -۱۴)

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

چکیده

ساختار مولکولی بیست صورت بندی مولکول (Z) ۲-هیدروکسی سایلیلین استالدئید (HSA) در سطوح محاسباتی MP2 وB3LYP با تابع پایه $6-311++G^{**}$ و سطح G2MP2 به طور کامل بهینه گردیده است در حالت کلی ساختارهای انولی حلقوی نظیر صورت بندی های $(E-K1)$ و $(K-E1)$.نسبت به سایرصورت بندیهای مورد بررسی پایدار تر می باشند. به علاوه محاسبات برای تمامی صورت بندیها ی مولکول (Z) ۲-هیدروکسی سایلیلین استالدئید در حلال آب و در سطح محاسباتی B3LYP با تابع پایه $6-311++G^{**}$ نیز انجام شده است. در نهایت آنالیز پیوند هیدروژنی در این مولکولها با نظریه AIM و NBO به خوبی نتایج قبلی را تایید می کند. در کاری دیگر، پیوند هیدروژنی درون مولکولی و ساختار (Z) ۲-هیدروکسی سایلیلین استالدئید و مشتقات استخلافی آن در سطح B3LYP با تابع پایه $6-311++G^{**}$ مورد بررسی قرار گرفته است. در این کار انرژی سد چرخشی و انواع شاخص های آروماتیسیتی نیز برای مولکول مادر و مشتقات آنها نیز انجام شده است. تمامی محاسبات در فاز گازی و در سطح محاسباتی B3LYP با تابع پایه $6-311++G^{**}$ انجام شده است و اثر سیزده استخلاف در سه موقعیت R_3, R_2R_1 مولکول مادر نیز مورد بررسی قرار گرفته است. در این کار مقادیر فرکانس ارتعاشی و خمشی نیز بدست آمده است که با استفاده از این پارامترها می توان مقدار انرژی پیوند هیدروژنی را بدست آورد. به علاوه این محاسبات در حلال های آب و CCl_4 و در سطح محاسباتی B3LYP با تابع پایه $6-311++G^{**}$ نیز انجام شده است. مقادیر شاخص های مختلف آروماتیسیتی نظیر FLU ، ATI ، HOMA، PDI و NICS برای تمامی استخلافها در سه موقعیت R_3, R_2R_1 بدست آمده است. از طرف دیگر محاسبات انتقال پروتون برای بدست آوردن حالت گذار نیز انجام شده است.. مقادیر انرژی فعال سازی، فاکتور فرکانس، ثابت آرنیوس، ثابت سرعت و سایر پارامترهای ترمودینامیکی در این کار برای همه استخلافهای مورد بررسی و در سه موقعیت مختلف ارزیابی شده است. در نهایت با چرخاندن صورت بندی های بررسی شده حول پیوندهای مختلف و تبدیل آنها به یکدیگر مسیر واکنش بدست آمده است.

فهرست مطالب

عنوان صفحه

فصل اول : روشهای محاسباتی

۱-۱ مقدمه ۲

۱-۲ انواع مدلهای مولکولی و روشهای محاسباتی ۳

۱-۲-۱ روش های اصول اولیه ساختار الکترونی یا Ab- initio ۴

۱-۲-۱-۱ تقریب راه حلهای غیر نسبیتی ۴

۱-۲-۱-۲ تقریب بورن - اپنهایمر ۵

۱-۲-۱-۳ تقریب ذره ساده ۵

۱-۲-۲ انواع مجموعه های پایه ۶

۱-۲-۲-۱ مجموعه پایه کمینه ۶

۱-۲-۲-۲ مجموعه پایه ظرفیتی- شکافته ۷

۱-۲-۲-۳ مجموعه پایه نفوذی ۸

۱-۲-۲-۴ سری پایه قطبیده ۸

۱-۲-۲-۵ مجموعه پایه اندازه حرکت زاویه ای بالا ۹

۱-۲-۳ روش هارتری- فوک (HF) ۱۰

۱-۲-۴ همبستگی الکترون ۱۱

۱-۲-۴-۱ روش های POST-HF ۱۲

۱-۲-۴-۲ روش برهم کنش پیکربندی CI ۱۲

۱-۲-۴-۳ روش MP ۱۴

۱-۳ روشهای نیم- تجربی ۱۶

۱-۳-۱روش های هوکل وهوکل پیشرفته ۱۷

۱-۳-۲ روش پاریزر ــ پار ــپوپل ۱۷

۱-۴ نظریه اتم ها در مولکولها (AIM) ۱۸

۱-۴-۱ تشخیص پیوند هیدروژنی به کمک نظریه AIM ۲۱

۱-۴-۱-۱ یافتن IAS، BP و BCP در هر پیوند هیدروژنی ۲۱

۱-۴-۱-۲ مقدار چگالی الکترونی (ρ) در نقاط بحرانی (BCP) ۲۱

۱-۴-۱-۳ مقدار لاپلاسین $(\nabla^2\rho)\rho$ ۲۲

۱-۵ نظریه اربیتال پیوندی طبیعی (NBO) ۲۳

۱-۶ روشهای تابعی چگال (DFT) ۲۴

۱-۷ مزایا ومعایب روش های محاسباتی ۲۴

فصل دوم : شاخص های آروماتیسیتی

۲-۱ مقدمه ۲۸

۲-۲ مدل نوسانگر هماهنگ آروماتیسیتی ۲۹

۲-۳ جابه جایی شیمیایی مستقل از میدان ۳۱

۲-۳-۱ ضعف جابه جایی شیمیایی مستقل از میدان ۳۱

۲-۴ انرژی پایدارسازی آروماتیکی ۳۲

۲-۵ حفره فرمی وشاخص عدم استقرار ۳۳

۲-۶ عدم استقرار الکترون در سیستمهای آروماتیکی ۳۴

۲-۷ شاخص عدم استقرار-پارا ۳۵

۲-۸ شاخص اختلال آروماتیک ۳۶

۲-۹ شاخص آروماتیک π – نوسانی (FLU_{π}) ۳۷

۲-۱۰ مقایسه نتایج بدست آمده از ارتباط بین FLU با شاخص های دیگر آروماتیسیتی... .....۳۸

۲-۱۰-۱ نتایج حاصل از مقایسه شاخص FLU با پارامتر $HOMA$ ۳۸

۲-۱۰-۲ نتایج حاصل از مقایسه شاخص FLU با پارامتر $NICS$ ۳۹

۲-۱۰-۳ نتایج حاصل از مقایسه شاخص FLU با پارامتر PDI ۳۹

۲-۱۰-۴ نتایج حاصل از مقایسه شاخص FLU با پارامتر FLU_{π} ۴۰

فصل سوم : بررسی ساختار مولکولی و صورت بندی های مختلف ترکیب (Z) ۲-هیدروکسی سیلیلن استالدئید

۳-۱ مقدمه..... ۴۵

۳-۲ روش محاسبات ۴۷

۳-۳ بررسی ساختار مولکولی، پیوند هیدروژنی و صورت بندی های مختلف ترکیب (Z) ۲-هیدروکسی سیلیلن استالدئید (HSA) ۴۸

۳-۳-۱ بررسی گروه کتو- کتونی $(K-K)$ ۵۰

۳-۳-۲ بررسی گروه انول- کتونی $(E-K)$ ۵۰

۳-۳-۳ بررسی گروه کتو- انولی $(K-E)$ ۵۳

۳-۴ مقایسه دو صورت بندی $K-E1$ و $E-K1$ ۶۱

۳-۵ مقایسه دو صورت بندی $K-E4, E-K4$ ۶۳

۳-۶ تجزیه و تحلیل AIM برای صورت بندی های (HSA) ۶۴

۳-۶-۱ گروه کتو- انولی $(K-E)$ ۶۵

۳-۶-۲ گروه انول-کتونی $(E-K)$ ۶۶

۳-۷ مقایسه دو صورت بندی $K-E1$ و $E-K1$ با استفاده از روش AIM ۶۶

۳-۸ تجزیه و تحلیل NBO ۶۷

۳-۹ بررسی ساختار مولکولی و صورت بندی های مختلف مولکول HSA در حلال آب ومقایسه نتایج با فاز گازی ۶۸

۳-۹-۱ مقایسه دو صورت بندی $K-E1$ و $E-K1$ در فاز محلول ۷۴

۳-۱۰ مقایسه استحکام پیوند هیدروژنی صورت بندی E-K1 با دو مولکول مالونالدئید ۷۴

۳-۱۰-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۷۶

۳-۱۰-۲ تجزیه و تحلیل NBO ۷۶

فصل چهارم : بررسی اثر استخلاف روی ترکیب (Z) ۲-هیدروکسی سیلیلن استالدئید

۴-۱ مقدمه ۷۸

۴-۲ روشهای محاسباتی ۷۹

۴-۳ بررسی اثر استخلاف ها بر ساختار،قدرت پیوند هیدروژنی وشاخص های آروماتیسیتی ترکیب HSA در مو

قعیت R_1 در فاز گازی ۸۰

۴-۳-۱ ترکیب z-۱- (هیدروکسی سیلیلن) استون..... ۸۰

۴-۳-۱-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۸۲

۴-۳-۱-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۸۲

۴-۳-۲ ترکیب z- (هیدروکسی سیلیلن) استویل کلرید..... ۸۳

۴-۳-۲-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۸۴

۴-۳-۲-۲ تجزیه وتحلیل NBO..... ۸۴

۴-۳-۳ ترکیب z -۳- (هیدروکسی سیلیلن) -۲- اکسو پروپان نیتریل..... ۸۵

۴-۳-۳-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۸۶

۴-۳-۳-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۸۶

۴-۳-۴ ترکیبz - (هیدروکسی سیلیلن) استویل فلوئورید..... ۸۷

۴-۳-۴-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۸۸

۴-۳-۴-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۸۹

۴-۳-۵ ترکیب z -۲- (هیدروکسی سیلیلن) استامید..... ۸۹

۴-۳-۵-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۹۰

۴-۳-۵-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۹۰

۴-۳-۶ ترکیب z-(۲- نیترو-۲-اکسو اتیلیدن) سیلانول..... ۹۱

۴-۳-۶-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۹۳

۴-۳-۶-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۹۳

۴-۳-۷ ترکیب z-۲- (هیدروکسی سیلیلن) استیک اسید..... ۹۳

۴-۳-۷-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۹۵

۴-۳-۷-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۹۵

۴-۳-۸ ترکیب متیل (Z)- (هیدروکسی سیلیلن) استات..... ۹۶

۴-۳-۸-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۹۷

۴-۳-۸-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۹۸

۴-۳-۹ ترکیب S-متیل (Z)- هیدروکسی سیلیلن) اتان تیوات..... ۹۸

۴-۳-۹-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۰۰

۴-۳-۹-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۰۰

۴-۳-۱۰ ترکیب Z-(هیدروکسی سیلیلن) اتان تیویک S- اسید..... ۱۰۰

۴-۳-۱۰-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۰۲

۴-۳-۱۰-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۰۲

۴-۳-۱۱ ترکیب Z-۱-(هیدروکسی سیلیلن) بوتان-۲و۳-دی ان..... ۱۰۳

۴-۳-۱۱-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۰۵

۴-۳-۱۱-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۰۵

۴-۳-۱۲ ترکیب (Z)-۳- (هیدروکسی سیلیلن)-۲- اکسو پروپانال..... ۱۰۶

۴-۳-۱۲-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۰۷

۴-۳-۱۲-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۰۸

۴-۳-۱۳ ترکیب (Z)- ۱و۱و۱- تری فلوئورو-۳- (هیدروکسی سیلیلن) استون..... ۱۰۸

۴-۳-۱۳-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۰۹

۴-۳-۱۳-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۱۰

۴-۴ بررسی اثر استخلاف ها بر ساختار و قدرت پیوند هیدروژنی ترکیب HSA در مو قعیت R_2

در فاز گازی ۱۱۰

۴-۴-۱ ترکیب (Z)- (هیدروکسی سیلیلن) پروپانال..... ۱۱۰

۴-۴-۱-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۱۲

۴-۴-۱-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۱۲

۴-۴-۲ ترکیب (E)- کلرو (هیدروکسی سیلیلن) استالدئید..... ۱۱۲

۴-۴-۲-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۱۴

۴-۴-۲-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۱۴

۴-۴-۳ ترکیب (Z)-۲- (هیدروکسی سیلیلن) ۳-اکسو پروپان نیتریل..... ۱۱۴

۴-۴-۳-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۱۶

۴-۴-۳-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۱۶

۴-۴-۴ ترکیب (E)- فلوئورو (هیدروکسی سیلیلن استالدئید..... ۱۱۶

۴-۴-۴-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۱۸

۴-۴-۴-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۱۸

۴-۴-۵ ترکیب(E)- آمینو (هیدروکسی سیلیلن) استالدئید..... ۱۱۹

۴-۴-۵-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۱۹

۴-۴-۵-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۲۰
۴-۴-۶ ترکیب (E)- (هیدروکسی سیلیلن) (نیترو) استالدئید..... ۱۲۰
۴-۴-۶-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۲۲
۴-۴-۶-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۲۲
۴-۴-۷ ترکیب (E)- هیدروکسی (هیدروکسی سیلیلن) استالدئید..... ۱۲۳
۴-۴-۷-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۲۴
۴-۴-۷-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۲۵
۴-۴-۸ ترکیب (E)- (هیدروکسی سیلیلن)(متوکسی) استالدئید..... ۱۲۵
۴-۴-۸-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۲۷
۴-۴-۸-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۲۷
۴-۴-۹ ترکیب (E)- (هیدروکسی سیلیلن) (متیل تیو) استالدئید..... ۱۲۷
۴-۴-۹-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۲۹
۴-۴-۹-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۲۹
۴-۴-۱۰ ترکیب (E)- (هیدروکسی سیلیلن) (مرکاپتو) استالدئید..... ۱۳۰
۴-۴-۱۰-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۳۱
۴-۴-۱۰-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۳۱

۴-۴-۱۱ ترکیب (E)-۲- (هیدروکسی سیلیلن)-۳-اکسو بوتانال ۱۳۲

۴-۴-۱۱-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۳۴

۴-۴-۱۱-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۳۴

۴-۴-۱۲ ترکیب (هیدروکسی سیلیلن) مالونالدئید ۱۳۴

۴-۴-۱۲-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۳۶

۴-۴-۱۲-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۳۶

۴-۴-۱۳ ترکیب (E)-۳و۳و۳- تری فلوئورو-۲-(هیدروکسی سیلیلن) پروپانال ۱۳۶

۴-۴-۱۳-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۳۸

۴-۴-۱۳-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۳۸

۴-۵ بررسی اثر استخلاف ها بر ساختار،قدرت پیوند هیدروژنی ترکیب HSA در موقعیت R_3 در

فاز گازی ۱۳۹

۴-۵-۱ ترکیب (Z)[هیدروکسی (متیل) سیلیلن] استالدئید ۱۳۹

۴-۵-۱-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۴۰

۴-۵-۱-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۴۱

۴-۵-۲ ترکیب (E)[کلرو (هیدروکسی) سیلیلن] استالدئید ۱۴۲

۴-۵-۲-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۴۳

۴-۵-۲-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۴۴
۴-۵-۳ ترکیب (Z)- هیدروکسی (۲-اکسو اتیلیدن) سیلان کربو نیتریل..... ۱۴۴
۴-۵-۳-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۴۶
۴-۵-۳-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۴۶
۴-۵-۴ ترکیب (E)-[فلوئورو(هیدروکسی) سیلیلن] استالدئید ۱۴۶
۴-۵-۴-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۴۸
۴-۵-۴-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۴۸
۴-۵-۵ ترکیب (Z)- [آمینو (هیدروکسی) سیلیلن] استالدئید..... ۱۴۹
۴-۵-۵-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۵۱
۴-۵-۵-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۵۲
۴-۵-۶ ترکیب (Z)-[هیدروکسیل (نیترو) سیلیلن] استالدئید..... ۱۵۲
۴-۵-۶-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۵۳
۴-۵-۶-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۵۴
۴-۵-۷ ترکیب (دی هیدروکسی سیلیلن) استالدئید..... ۱۵۴
۴-۵-۷-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۵۶
۴-۵-۷-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۵۷

۴-۵-۸ ترکیب (E)-[هیدروکسیل (متوکسی) سیلیلن] استالدئید ۱۵۷
۴-۵-۸-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۵۹
۴-۵-۸-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۶۰
۴-۵-۹ ترکیب (E)-[هیدروکسیل (متیل تیو) سیلیلن] استالدئید ۱۶۰
۴-۵-۹-۱ تجزیه و تحلیل AIM ..... ۱۶۲.
۴-۵-۹-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۶۲
۴-۵-۱۰ ترکیب (E)- [هیدروکسیل (مرکاپتو) سیلیلن] استالدئید ۱۶۳
۴-۵-۱۰-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۶۵
۴-۵-۱۰-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۶۵
۴-۵-۱۱ ترکیب (Z)-[استیل (هیدروکسی) سیلیلن] استالدئید ۱۶۵
۴-۵-۱۱-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۶۷
۴-۵-۱۱-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۶۸
۴-۵-۱۲ ترکیب (Z)- هیدروکسی (۲- اکسو اتیلیدن) سیلان کربالدئید ۱۶۹
۴-۵-۱۲-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۶۹
۴-۵-۱۲-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۶۹
۴-۵-۱۳ ترکیب (Z)-[هیدروکسی (تری فلوئورو متیل) سیلیلن] استالدئید ۱۷۰

۴-۵-۱۳-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۷۱

۴-۵-۱۳-۲ تجزیه وتحلیل NBO ۱۷۲

۴-۶ بررسی اثر استخلاف بر روی شاخص های آروماتیسیتی و بررسی وابستگی این شاخص ها با پارامترهای RCP در ترکیب HSA ۱۷۲

۴-۶-۱ بررسی اثر استخلاف بر روی شاخص های آروماتیسیتی و بررسی وابستگی این شاخص ها با پارامترهای RCP در ترکیب HSA در موقعیت R_1 ..... ۱۷۲

۴-۶-۲ بررسی اثر استخلاف بر روی شاخص های آروماتیسیتی و بررسی وابستگی این شاخص ها با پارامترهای RCP در ترکیب HSA در موقعیت R_2 ..... ۱۷۲

۴-۶-۳ بررسی اثر استخلاف بر روی شاخص های آروماتیسیتی و بررسی وابستگی این شاخص ها با پارامترهای RCP در ترکیب HSA در موقعیت R_3 ..... ۱۷۴

۴-۷ بررسی اثر استخلاف ها بر روی انرژی سد چرخشی در ترکیب HSA در فاز گازی ۱۷۶

۴-۷-۱ بررسی اثر استخلاف ها بر روی انرژی سد چرخشی در ترکیب HSA در موقعیت R_1 ..... ۱۷۷

۴-۷-۲ بررسی اثر استخلاف ها بر روی انرژی سد چرخشی در ترکیب HSA در موقعیت R_2 ..... ۱۷۸

۴-۷-۳ بررسی اثر استخلاف ها بر روی انرژی سد چرخشی در ترکیب HSA در موقعیت R_3 ..... ۱۷۸

۴-۸ بررسی اثر استخلاف ها بر ساختار،قدرت پیوند هیدروژنی وشاخص ساختاری آروماتیسیتی ترکیب HSA در حلال آب ۱۷۸

۴-۸-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۸۰

۴-۹ بررسی اثر استخلاف ها بر روی ساختار، قدرت پیوند هیدروژنی، انرژی سد چرخشی و شاخص ساختاری آروماتیسیتی ترکیب HSA در حلال CCl_4 ..... ۱۸۰

۴-۹-۱ تجزیه و تحلیل AIM ۱۸۱

فصل پنجم : انتقال پروتون

۵-۱ مقدمه ۱۹۳

۵-۲ محاسبه ثابت سرعت و پارامترهای ترمودینامیکی واکنش انتقال پروتون ۱۹۴

۵-۲-۱ روش انجام محاسبات ۱۹۴

۵-۲-۲ نتایج محاسبات ۱۹۵

۵-۳ سطح انرژی پتانسیل (PES) در صورت بندی های مختلف ترکیب HSA..... ۱۹۷

فهرست جداول

عنوان صفحه

جدول (۳-۱) پارامترهای ساختاری بهینه شده (طول پیوند)برای صورت بندی های KE در سطح $B3LYP$ با تابع پایه $6-311++G^{**}$ ۲۲۹

جدول (۳-۲) پارامترهای ساختاری بهینه شده (طول پیوند)برای صورت بندی های $E-K$ در سطح $B3LYP$ با تابع پایه $6-311++G^{**}$ ۲۲۹

جدول (۳-۳) پارامترهای ساختاری بهینه شده (طول پیوند)برای صورت بندی های $K-E$ در سطح MP_2 با تابع پایه $6-311++G^{**}$ ۲۳۰

جدول (۳-۴) پارامترهای ساختاری بهینه شده (طول پیوند)برای صورت بندی های $E-K$ در سطح MP_2 با تابع پایه $6-311++G^{**}$ ۲۳۰

جدول (۳-۵) پارامترهای ساختاری بهینه شده (طول پیوند)برای صورت بندی های $K-E$ در سطح G2MP2 و با تابع پایه $6-311++G^{**}$ ۲۳۱

جدول (۳-۶) پارامترهای ساختاری بهینه شده (طول پیوند)برای صورت بندی های $E-K$ در سطح G2MP2 و با تابع پایه $6-311++G^{**}$ ۲۳۱

جدول(۳-۷) پارامترهای توپولوژیکی گروه $K-E$ در سطح B3LYP با تابع پایه $6-311++G^{**}$ ۲۳۲

جدول (۳-۸) پارامترهای توپولوژیکی گروه $E-K$ در سطح B3LYP با تابع پایه $6-311++G^{**}$ ۲۳۲