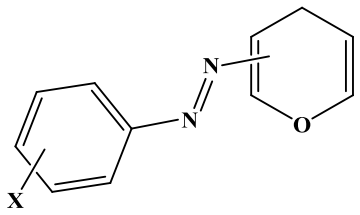
مطالعه ی ساختار $4H$-پیران های دارای پل آزو با محاسبات ab-initio

سیده پرنیا حلمی

مشتقات زانتن به علت دارا بودن خواص بیولوژیکی متنوع و خواص دارویی از قبیل ضد ویروس، ضد باکتری و ضد التهاب مورد توجه بسیاری از شیمی دان ها قرار گرفته اند. در سال های اخیر مطالعه های زیادی روی سنتز مشتقات جدید و هم چنین ارائه روش های جدید سنتز آنها انجام گرفته است.

در این تحقیق، محاسبات نظریه تابع چگالی در تراز B3LYP برای بهینه سازی ساختار ترکیبات به کار رفت. در ادامه مطالعه، همو آروماتیسیته ترکیبات انتخاب شده با استفاده از شاخص جابجایی شیمیایی مستقل از هسته (NICS) مورد بررسی قرار گرفت.



شمای

واژگان کلیدی: زانتن، جابجایی شیمیایی مستقل از هسته، هموآروماتیسیتی، نظریه تابع چگالی