

تحلیل NMR و بررسی hybrid-DFT آروماتیسیتته ۳- بعدی در دی بوران،  
دی آلان، دی گالان و دی ایندان

غلامعباس کسایی

گروه شیمی، واحد دورود، دانشگاه آزاد اسلامی، دورود، ایران

داود نوری شرق\*

گروه شیمی، واحد اراک، دانشگاه آزاد اسلامی، اراک، ایران

حسین عطار

گروه مهندسی شیمی، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

حوریه یحیایی

گروه شیمی، واحد زنجان، دانشگاه آزاد اسلامی، زنجان، ایران

سیده نگار موسوی

گروه شیمی، واحد اراک، دانشگاه آزاد اسلامی، اراک، ایران

تاریخ پذیرش: ۸۸/۴/۳

تاریخ دریافت: ۸۸/۲/۲

چکیده

مقدمه: تحلیل NMR و روش hybrid-DFT (B3LYP/Def2-TZVPP) برای بررسی همبستگی آروماتیسیتته ۳- بعدی و انرژی های تفکیک دی بوران، دی آلان، دی گالان و دی ایندان به منومرهای مربوطه مورد استفاده قرار گرفته است.

هدف: همبستگی بین خاصیت آروماتیکی و انرژی های تفکیک دی بوران، دی آلان، دی گالان و دی ایندان به منومرهای مربوطه مورد بررسی قرار گرفته است.

**نتایج:** نتایج حاصل نشان می دهد که خاصیت آروماتیکی از دی بوران به دی ایندان کاهش می یابد. خاصیت آروماتیکی ترکیبات مذکور با جابجایی شیمیایی هسته غیر وابسته (NICS(0), NICS(0.2), NICS(0.4) and NICS(0.6)) نشان داده می شود.

**نتیجه گیری:** ارتباط معنی داری بین کاهش اجزای جابجایی شیمیایی  $\sigma_{22}$  (یعنی  $\sigma_{yy}$ ) صفحه در بر گیرند اتم های هیدروژن در موقعیت پل) مقادیر NICS و انرژی های تفکیک دیمرها به منومرها وجود دارد.

**واژه های کلیدی:** محاسبات hybrid-DFT، NICS، دی بوران، دی آلان، دی گالان، دی ایندان