

# SID



سرویس های ویژه



سرویس ترجمه تخصصی



کارگاه های آموزشی



بلاگ مرکز اطلاعات علمی



عضویت در خبرنامه



فیلم های آموزشی

## کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی جهاد دانشگاهی



مباحث پیشرفته یادگیری عمیق؛  
شبکه های توجه گرافی  
(Graph Attention Networks)



کارگاه آنلاین آموزش استفاده از  
وب آو ساینس



کارگاه آنلاین مقاله روزمره انگلیسی

تحلیل NMR و بررسی hybrid-DFT آروماتیسیته 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 آروماتیسیته 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.

\*عهده دار مکاتبات: nori\_ir@yahoo.com. تلفکس: ۰۲۱-۴۴۸۱۶۱۱۰

**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

# SID



سرویس های ویژه



سرویس ترجمه تخصصی



کارگاه های آموزشی



بلاگ مرکز اطلاعات علمی



عضویت در خبرنامه



فیلم های آموزشی

## کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی جهاد دانشگاهی



مباحث پیشرفته یادگیری عمیق؛  
شبکه های توجه گرافی  
(Graph Attention Networks)



کارگاه آنلاین آموزش استفاده از  
وب آوساینس



کارگاه آنلاین مقاله روزمره انگلیسی