

# SID



ابزارهای  
پژوهش



سرویس ترجمه  
تخصصی



کارگاه های  
آموزشی



بلاگ  
مرکز اطلاعات علمی



سامانه ویراستاری  
STES



فیلم های  
آموزشی

## کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی



توسعه آموزش  
آموزش مهارت های کاربردی در تدوین و چاپ مقالات ISI

آموزش مهارت های کاربردی  
در تدوین و چاپ مقالات ISI



توسعه آموزش  
روش تحقیق کمی

روش تحقیق کمی



توسعه آموزش  
آموزش نرم افزار Word برای پژوهشگران

آموزش نرم افزار Word  
برای پژوهشگران

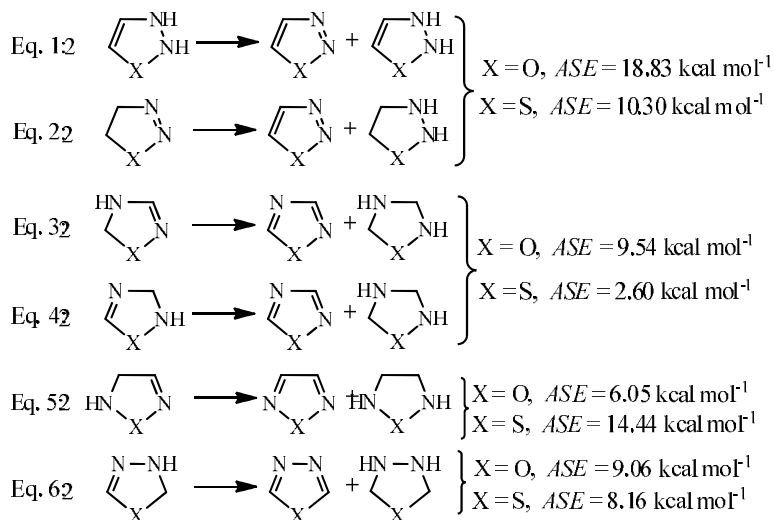
## Aromatic stabilization energies of oxadiazoles and thiadiazoles. A hybrid-density functional theory study

*M. Karimi\**, D. Nori-Shargh

Department of Chemistry, Islamic Azad University, Arak Branch, Arak, Iran;

Email: masoudkarimi67@gmail.com

Oxadiazoles and thiazole are five-membered heterocyclic aromatic compounds consisting of one oxygen or sulphur atom, two nitrogen and two carbon atoms [1]. In this work, the aromatic stabilization energies (*ASE*) in the various isomers oxadiazoles and thiadiazoles have been investigated by means of B3LYP/6-311+G\*\* level of theory [3]. Similar to the equation argued as a measure of the *ASE* for benzene [3], we also used the homodesmotic and strain-balanced<sup>3</sup>Eqs. (1-6) to evaluate the *ASE* in the the1,2,3-, 1,2,4-, 1,2,5-, 1,3,4-oxadiazole and -thiazole isomers (see Scheme 1). In the isodesmotic reactions [Eqs. (1-6)], almost everything except the electron delocalization of the  $\sigma$ - and  $\pi$ -electrons are conserved, and the energy of each reaction would mainly provide the stabilization energy due to the  $\sigma$ - $\pi$  electron conjugation of the corresponding molecule. Based on Eq. (5) results showed that the *ASE* calculated for the 1,2,5-isomer of thiazole is greater than the corresponding value in oxadiazole.



Scheme 1

### References:

1. J.A. Joule, K. Mills, G.F. Smith, *Heterocycl. Chem. 3rd Edition, A John Wiley & Sons, Ltd., Publication. (2010)* 452.
2. Y. Li, J. Geng, Y. Liu, S. Yu, G. Zhao, *Chem. Med. Chem. 8 (2013)* 27.
3. M.J. Frisch, *Inc., Wallingford CT. (2004)*.

# SID



ابزارهای  
پژوهش



سرویس ترجمه  
تخصصی



کارگاه های  
آموزشی



بلاگ  
مرکز اطلاعات علمی



سامانه ویراستاری  
STES



فیلم های  
آموزشی

## کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی



کارگاه آموزشی  
آموزش مهارت های کاربردی در تدوین و چاپ مقالات ISI

آموزش مهارت های کاربردی  
در تدوین و چاپ مقالات ISI



کارگاه آموزشی  
روش تحقیق کمی

روش تحقیق کمی



کارگاه آموزشی  
آموزش نرم افزار Word برای پژوهشگران

آموزش نرم افزار Word  
برای پژوهشگران