

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



آموزش مهارت های کاربردی در تدوین و چاپ مقالات ISI

آموزش مهارت های کاربردی
در تدوین و چاپ مقالات ISI



روش تحقیق کمی

روش تحقیق کمی



آموزش نرم افزار Word برای پژوهشگران

آموزش نرم افزار Word
برای پژوهشگران



DFT and MP2 calculations on tautomerism of aminonitrofurazan

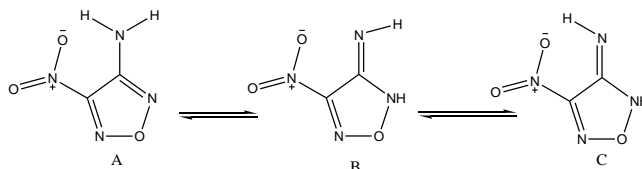
Alireza SalimiBeni*, Maryam Zarandi

Department of Chemistry, Faculty of Science, Yasouj University, Yasouj, Iran;

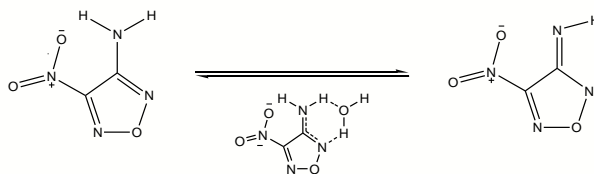
Email: Salimibeni@yu.ac.ir

Amino derivatives of furazan are widely used as building blocks in fine organic syntheses [1-2]. On the other hand, These compounds may also be considered as promising high-energy components in explosive and propellant formulations. Aminofurazans were the objects of different physicochemical investigations [3-4].

In continuation of our interest in the physicochemical properties of amino derivatives of furazan, DFT and MP2 molecular orbital calculation have been performed on the intramolecular tautomerism of all three isomers of aminonitrofurazan in the gas phase and solution (Scheme 1). The intrinsic reaction coordination (IRC) for the tautomeric processes was trace to connect the transition structures (Scheme 2). The energy barriers calculated at various level theories are reported for each tautomeric interconversion. The specific solvent effect has been evaluated.



Scheme 1.



Scheme 2.

The result of DFT and MP2 calculations show that A is the most stable tautomer in the gas phase in order of $A > C > B$.

References:

1. Sheremetev, A. B. *Heterocycl. Chem.* **1995**, 32-371-385.
2. Rostislav, E.; Trifonov, A.; Gaenko, S.; Vergizov, M.; Shcherbinin, V. *Croat. Chem. Acta* **2003**, *76*, 177-182.
3. Tselinskii, I. V.; Mel'nikova, S. F.; Zelenov, M. P. *Russ. J. Org. Chem.* **1996**, *32*, 734-737.
4. Viterbo, D.; Serafino, A.; *Acta Crystallogr. Sec. B* **1978**, *34*, 3444-3446.



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



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

آموزش مهارت های کاربردی
در تدوین و چاپ مقالات ISI



تازه های آموزش
روش تحقیق کمی

روش تحقیق کمی



تازه های آموزش
آموزش نرم افزار Word برای پژوهشگران

آموزش نرم افزار Word
برای پژوهشگران