



چهارمین همایش شیمی، مهندسی شیمی و نانو ایران، دانشگاه تهران

بررسی تئوری و مقایسه اثر استخلافهای مختلف در فاز گازی و آب بر روی خواص سینتیکی و ترمودینامیکی فرایندهای توتومریزاسیون 5-X آمینو -1,3,4-اکسادیازول -2(3H) اون

1- عبدالرضا فرامرزی پلنگر، سازمان آموزش و پرورش استان گلستان - شهرستان کلاله - faramarzi_iran@yahoo.com

2 - علی ملایی، سازمان آموزش و پرورش استان گلستان - شهرستان آزادشهر - amolaei@ymail.com

3-ابراهیم غلامی، سازمان آموزش و پرورش استان گلستان - شهرستان کلاله - ebrahim.gholamy@ymail.com

چکیده :

در این تحقیق بررسی توتومری و حالات گذار را در یکی از مشتقات 1,3,4- اکسادیازول را در چهار توتومر A, B, C, D در فاز گازی و آب را بررسی کردیم و محاسبات ما با استفاده از روش تئوری تابعی چگال (DFT) در سطح محاسباتی B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-311++G(d,p) انجام شده است. در ابتدا چهار توتومر را در سطح محاسباتی مورد نظر را در فاز گازی و آب بهینه کردیم سپس حالت گذار آنها را بدست آوردیم و فهمیدیم که از بین چهار توتومر حالت $C \rightarrow D$ از همه پایدارتر است چون انرژی کمتری نسبت به بقیه دارد و حالت گذار $A \rightarrow D$ از همه ناپایدارتر است چون بیشترین مقدار انرژی را دارد. و همچنین محاسبات نشان می دهند که توتومر $C \rightarrow D$ کمترین مقدار انرژی آزاد گیبس را دارد و همچنین بیشترین مقدار K_{eq} را در فاز گازی و آب دارد. و همچنین محاسبات نشان می دهد که بیشترین سرعت رفت در حالت گذار را $C \rightarrow D$ استخلاف فلوئور در فاز گازی دارد و کمترین سرعت رفت در حالت گذار را توتومر $A \rightarrow D$ و استخلاف کلر در فاز آب دارد و بیشترین مقدار سرعت رفت در حالت گذار را توتومر $A \rightarrow D$ در استخلاف برم و در فاز گاز و درحالی که کمترین مقدار سرعت رفت و در حالت گذار را توتومر $C \rightarrow D$ با استخلاف فلوئور و فاز گازی را دارد.

واژه های کلیدی :

اکسادیازول، محاسبات (DFT)، توتومریزاسیون، حالت گذار، هالوژن، انتقال پروتون

Theoretical investigation and comparison of the effect of different substituents tautomerization process in gas and water phase of 5-(x-amino)-1,3,4-oxadiazol -2(3H)-one

Abdolreza FaramarziPalangar-The provincial Education-kalaleh city- faramarzi_iran@yahoo.com

Ali molaei - The provincial Education-Azad shaher city- amolaei@ymail.com

Ebrahim gholamy--The provincial Education-kalaleh city- ebrahim.gholamy@ymail.com

Abstract:

Investigation of tautomerism and transition states in a derivative of 1,3,4-oxadiazole (A, B, C and D) in the gas and water phase was performed by calculations at the DFT-B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory. The geometries of four possible tautomers of 5-(x-amino)-1,3,4-oxadiazole-2(3H)-one were optimized in the gas and water phase.

It was found that in the gas and water phase, transition states $C \rightarrow D$ and $A \rightarrow D$ tautomers are the most stable and unstable forms, respectively. The results show that the tautomeric interconversion $C \rightarrow D$ has the lowest Gibbs free energy changes and so the highest equilibrium constant in the gas and water phase. The calculated results show that the highest rate k forward in the transition states $C \rightarrow D$ in the substituent E in the gas phase and lowest rate k forward in the transition states $A \rightarrow D$ in the substituent Cl in the water phase and highest rate k reverse in the transition states $A \rightarrow D$ in the substituent Br in the gas phase and lowest rate k reverse in the transition states $C \rightarrow D$ in the substituent F in the water phase.

Keywords: Oxadiazole, Tautomerism, Proton transfer, DFT calculations, Halogen.