پیوند هیدروژنی درون مولکولی (E)-N'-(۴-فلورو-۲-هیدروکسی-بنزیلیدن) نیکوتینو هیدرازید: مطالعه‌ی نظری تابعی چگالی

زینب موسوی تکیه [*و ۱]

۱- گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، سمنان، ایران

خلاصه

ماهیت پیوند هیدروژنی درون مولکولی ترکیب (E)-N'-(۴-فلورو-۲-هیدروکسی-بنزیلیدن) نیکوتینو هیدرازید (4F) با استفاده از نظریه تابعی چگالی در سطح نظری B3LYP/6-311++G** مورد مطالعه و بررسی قرار گرفت. پارامترهای مرتبط به پیوند هیدروژنی برای پیوند هیدروژنی O-H···N با پارامترهای معادل آن در ترکیب بدون استخلاف آن؛ (۲-هیدروکسی-بنزیلیدن) نیکوتینو هیدرازید (2HBNH) مقایسه شد. نتایج فرکانس‌های ارتعاشی OH، جابه‌جایی شیمیایی و برخی پارامترهای ساختاری پیوند هیدروژنی قوی‌تری را برای ترکیب 4F نسبت به ترکیب 2HBNH پیش بینی می کند. نتایج ساختاری و ارتعاشی با در نظر گرفتن خواص چگالی الکترونی محاسبه شده با روش AIM و بار طبیعی اتم‌ها و انرژی برهمکنش مرتبه دوم اوربیتال‌ها، محاسبه شده در روش NBO توضیح داده شد.

کلمات کلیدی: پیوند هیدروژنی درون مولکولی، نظریه تابعی چگالی، نظریه اتم‌ها در مولکول، آنالیز اوربیتال پیوندی طبیعی، (E)-N'-(۴-فلورو-۲-هیدروکسی-بنزیلیدن) نیکوتینوهیدرازید

۱. مقدمه

پیوند هیدروژنی تقریباً ۱۰۰ سال پیش کشف شد با این وجود، هنوز هم موضوع بسیاری از تحقیقات علمی است. علت این پدیده، اهمیت پیوندهای هیدروژنی برای ساختار، عملکرد و دینامیک دسته‌ی گسترده‌ای از ترکیبات شیمیایی از ترکیبات معدنی تا ترکیبات دارویی و بیولوژیکی مواد است [۱].

امروزه، مشخص شده است که پیوند هیدروژنی فراتر از آن چیزی است که درگذشته بدان پرداخته شده است. پیوندهای هیدروژنی بسیار قوی، به پیوندهای کووالانسی در بسیاری از خصوصیات شبیه هستند و دیگر پیوندهای هیدروژنی که ضعیف به شمار می روند به سختی از برهم‌کنش‌های واندروالس متمایز می‌گردند. این پدیده با نوعی انتقال بار همراه است و غالب بودن خاصیت الکترواستاتیک پیوند هیدروژنی تنها برای چند پیکربندی معتبر است درحالی که برای دیگر پیکربندی‌ها صدق نمی‌کند [۲]. پیوندهای هیدروژنی نه فقط بین مولکول‌های مختلف، بلکه بین بخش‌های مختلف از یک مولکول نیز وجود

* **Corresponding author: Email: ztmoosavi@gmail.com**