عنوان طرح: تهيه تک کريستال و مطالعه تجربي و نظري ترکيب۳، ٤- دي آمينو-٥- متيل ۱، ۲ ،٤- تري آزول هيدروکلراید

مجري طرح : محمد حکيمي

مدت اجرا : ۱۲ ماه

چکيده

در اين تحقيق ترکيب ۳، ٤- دي آمينو-٥- متيل ۱، ۲ ،٤ تري آزول (DAMT) سنتز و سپس خالص سازي شده است. ترکيب DAMT از واکنش دي آمينو گوانيدين با اسيد استيک بدون حلال تهيه شده است. از اين ترکيب در حلال، تک کريستالهاي مناسب براي کريستالوگرافي تهيه گرديد. اين ترکيب بصورت نمک هيدروکلراید است. با کمک روشهاي MS، 1HNMR ، IR ، Raman و آناليز عنصري شناسايي انجام گرفت و تعيين ساختار آن توسط XRD تکميل گرديد. اندازه‌گيري با کريستال به ابعاد ۰,۲×۰,۲×۰,۲ انجام گرفته است. اين ترکيب در سيستم مونوکلينيک متبلور مي‌شود. گروه فضايي C2/c و گروه نقطه‌اي مولکول Cs مي‌باشد. سلول واحد با مشخصات Å (۱۸)=a=15.5162 , Å (7) =b=7.1608 , Å (13)=c=11.7018 , Å (۱٥)=90.0000=□=□ , Å (۱۷)=101.1069=□ , (2)=v=1275.8 و تعداد مولکولها در سلول واحد برابر ۸ است.

طيف زير قرمز و رامان اين ترکيب با استفاده از يك سري از سطوح نظريه تابعي چگال (DFT) با توابع پايه مختلف (B3LYP/6-31G*, B1LYP/6-31G** (HF/6-311++G** , HF/6-31G** , HF/6-31G* ,HF/STO-3G , B3LYP/4-31G* , B3LYP/6-311++G**, B3LYP/6-31G*, B3LYP/3-21G*, محاسبه و تجزيه و تحليل شد. ساختار هندسي ترکيب DAMT در سطوح محاسباتي مختلف با مقادير تجربي بدست آمده توسط XRD به وسيله روش تحليل برگشت‌ها مقايسه شد و در سطح B3LYP/6-31G** بهترين نتيجه بدست آمد. به علاوه، خصوصيات توپولوژيکي توزيع چگالي الکتروني براي تمامي پيوندها ترکيب مورد مطالعه توسط نظريه AIM تجزيه و تحليل شد و در نهايت، ارتباط قابل قبولي ميان عدم استقرار الکترونهاي و اين پارامترها مشاهده گرديد. به منظور بدست آوردن ميزان جفت‌شدگي نوارها، محاسبات مفصل تجزيه و تحليل شيوه‌هاي عادي انجام و توزيع انرژي پتانسيل (PED) براي ارتعاشات اساسي ترکيب محاسبه گرديد.