ملخص

تهدف الأطروحة إلى توسيع نطاق الملاحظات الحديثة بشكل منهجي والتي تشير إلى أن التشكل الجزيئي وأنماط اهتزازية معينة للبنزين متعدد الاستبدال تختلف بشدة عندما تختلف بيئتها. الجزيئات المحتفظ بها للدراسة هي بنزين مع بدائل الميثيل بالإضافة إلى الهالوجينات أو مجموعات النيترو ، سيتم إنشاء التشكل الجزيئي الدقيق عن طريق حيود الأشعة السينية أو تشتت النيوترونات غير المرنة في بيئات مختلفة: بلورات نقية ، جزيئات في أقفاص أو قنوات هالوتريازين.

تمت دراسة التفاعلات بين الجزيئات داخل هذه المركبات من خلال سطح Hirshfeld.

سيتم تخصيص مراجعة خاصة لدراسة تطور أوضاع "الدوران المقيد" والتحولات النفقية لمجموعات الميثيل.

في الوقت نفسه ، سيتم إجراء الحسابات النظرية باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية لتحديد التوافق الجزيئي ، والأنماط العادية للاهتزاز ، وكذلك توزيع الطاقة الكامنة.

نتائج حسابات ميكانيكا الكم التي أجراها (DFT) مع MPW1PW91 الوظيفية والأساس Lanl2DZ ، أدت إلى نتائج مماثلة في الزوايا وأطوال الروابط مقارنة بالتجربة.

سمحت الحسابات النظرية للتحليل الطيفي بتحديد أنماط الاهتزاز المختلفة للجزيئات المعزولة ، وستواجه الطيف التجريبي IR و Raman.

الكلمات المفتاحية: قنوات الهالوجينوتريازين ، حيود الأشعة السينية ، تشتت النيوترونات غير المرنة ، ميكانيكا الكم ، الأشعة تحت الحمراء ، رامان.