



بررسی قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی در مشتقات الکترون دهنده اورتو-هیدروکسی بازهای شیف

فاطمه دولتی*^۱، وحیدرضا داروگر^۱، زهره دولتی^۳، مژگان محمودی اول^۱، فائزه جلینی^۲

^۱گروه شیمی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران

^۲گروه شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد مشهد، مشهد، ایران

^۳گروه مهندسی پلیمر، دانشگاه پیام نور مشهد، مشهد، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۹۵/۰۹/۰۳، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۹۵/۱۱/۱۴، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۹۵/۱۲/۰۷

چکیده

در این پژوهش پیوند هیدروژنی در اورتو-هیدروکسی بازهای شیف و مشتقات آن بررسی می‌شود. از نظریه تابعی چگال برای بررسی دقیق تاتومری انول اورتو-هیدروکسی بازهای شیف که به وسیله گروه‌های استخلافی الکترون دهنده در موقعیت‌های R^1 ، R^2 و $R^{1,2}$ روی سیستم حلقه بازهای شیف جایگزین شده‌اند، استفاده می‌شود. ساختار هندسی هر مولکول در سطح $B3LYP/6-311++G^{**}$ بهینه می‌شود. بستگی خطی قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی با پارامترهای توپولوژیکی شامل $-G(r)/V(r)$ ، چگالی الکترونی نقطه بحرانی پیوند هیدروژنی، لاپلاسیان چگالی الکترونی کل پیوند هیدروژنی در نقطه بحرانی و پارامترهای ساختاری شامل طول و زوایای مرتبط با پیوند هیدروژنی مورد توجه قرار گرفته است. با استفاده از نتایج محاسبات اتمها در مولکول‌ها AIM، اهمیت استخلاف‌ها در مکان‌های R_1 ، R_2 و $R_{1,2}$ بر روی قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی اورتو-هیدروکسی بازهای شیف بررسی شده است.

واژه‌های کلیدی: پیوند هیدروژنی درون مولکولی، اورتو-هیدروکسی بازهای شیف (OHSB)، نظریه تابعی چگال، نقطه بحرانی.

۱. مقدمه

شیف بازها ترکیباتی هستند که در قرن اخیر توجه زیادی را به خود معطوف نموده‌اند [۱]. در دهه اخیر تعداد زیادی مقاله و کتاب در مورد این پیوند هیدروژنی در این ترکیبات منتشر شده است. زیرا پیوند هیدروژنی بخش مهمی را در شیمی و بیوشیمی به خود

*عهده دار مکاتبات: فاطمه دولتی

نشانی: ایران، مشهد، دانشگاه فردوسی مشهد، گروه شیمی

پست الکترونیک: f.dolati888@gmail.com

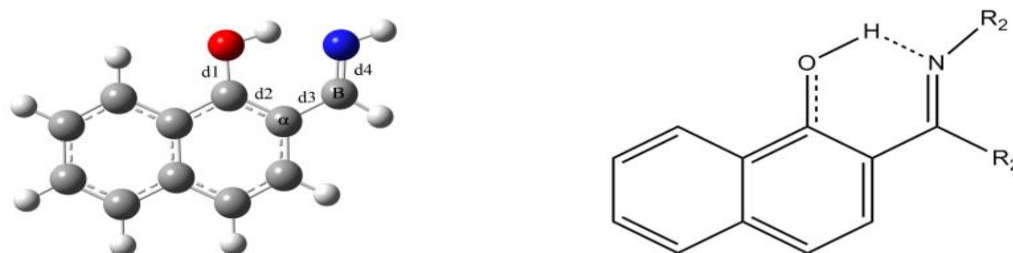
تلفن: ۰۹۰۱۷۶۸۷۵۳۰

اختصاص داده که علت آن اثر این نیرو بر روی ساختار ترکیبات مورد نظر [۲]، واکنش های شیمیایی و ساختار مولکول های حجیم است. هوگینز نشان داد که پیوند هیدروژنی نقش مهمی را در فرایند های بیولوژی، فیزیک، کریستالوگرافی، زمین شناسی و ... دارد [۳-۸]. اگر گروه های پروتون دهنده و پروتون گیرنده در مولکول باشند، یک پیوند هیدروژنی درون مولکولی [IHB] را ایجاد می کنند. هر دو این گروه ها می توانند از یک نوع یا متفاوت باشند. در صورتی که از برهمکنش این گروه ها یک سیستم حلقوی تشکیل شود، آن حلقه را حلقه کیلیتی (RCP) گویند. در شکل های سیس-انول بتا دی کتون ها، بتا آمینونون و بتا انامینو ایمین این ساختار کی لیتی مشاهده می شود. حلقه کیلیتی اغلب دارای شش اتم هستند [۹-۱۱]. قدرت پیوند هیدروژنی در این سیستم ها با خصلت رزونانس در سیستم الکترون های π افزایش می یابد. جیلی و همکاران [۱۲] این نوع پیوند هیدروژنی را پیوند هیدروژنی تقویت شده رزونانسی [RAHB] نامیدند. ساختار این نوع پیوند هیدروژنی به میزان رزونانس پیوند های کووالانسی در حلقه کی لیت بستگی دارد. در نتیجه تمام پارامتر های موثر در تغییر میزان الکترون های شرکت کننده در حلقه کیلیتی بر قدرت پیوند هیدروژنی اثر می گذارد. با جایگزینی اتم ها در موقعیت بتا (موقعیت R^2 که در شکل ۱ نشان داده شده است) با گروه های الکترون کشنده رزونانس سیستم π کاهش می یابد [۱۱-۱۳] در نتیجه گروه های الکترون کشنده قدرت پیوند هیدروژنی را کاهش می دهند [۱۴-۱۸]. در مولکولهای اورتو-هیدروکسی باز شیف در اثر جانشینی گروه های الکترون کشنده، درصد انول قابل پیش بینی است. اورتو-هیدروکسی شیف بازها موادی هستند که پیوند هیدروژنی درون مولکولی دارند در این مولکول ها یک پل N-H...O تشکیل می دهند و خواص ترمودینامیکی و فتوشیمیایی آنها بستگی مستقیمی به فرآیند انتقال پروتون در داخل آنها دارد. در این مولکولها یک پیوند هیدروژنی بین هیدروکسی حلقه فیل به عنوان پروتون دهنده و نیتروژن به عنوان پروتون کشنده به کار می رود. از این مواد به عنوان مواد ضد باکتری یا موادی با خواص نوری استفاده می شوند [۲-۶]. جانشینی کلر در اکثر مواقع باعث افزایش درصد انول می شود با این وجود درصد انولی در استخلاف های برم و ید به علت اثرات فضایی کاهش می یابد. اورتو-هیدروکسی شیف بازها به عنوان نوعی پیوند هیدروژنی درون مولکولی (RAHB) شناخته شده اند (شکل ۱). هدف از این مقاله بررسی اثرات جانشینی گروه های دهنده در موقعیت R^1, R^2 و $R^{1,2}$ در مولکول های اورتو-هیدروکسی باز شیف است. در این مطالعه قدرت پیوند هیدروژنی، رزونانس الکترون های π و هندسه سیستم پیوند هیدروژنی درون مولکولی مد نظر است. نظریه تابعی چگالی (DFT) و نظریه کوانتومی بیدر (QTAIM) در این پژوهش به کار رفته است. اثرات جانشینی گروه های دهنده مانند CH_3 ، SiH_3 ، $N(CH_3)$ ، OH ، NH_2 و SH اورتو-هیدروکسی بازهای شیف بررسی شده اند.

۲. روش های محاسباتی

تمام محاسبات حاضر با بسته نرم افزاری گوسین 09 با استفاده از سطح محاسباتی B3LYP انجام شده اند و بهینه سازی هندسه مولکول (پایه اورتو-هیدروکسی باز شیف) و مشتقات آن در مجموعه پایه G^{**++} 6-311 در فاز گازی انجام شد و ساختار های آنها بهینه گردید. محاسبات AIM با استفاده از برنامه AIM2000 انجام شد. در پایان، رابطه بین چند پارامتر با انرژی IHB نیز در نظر گرفته

شده است. طراحی ساختارها و انجام تجزیه و تحلیل رگرسیون با استفاده از نرم افزار مایکروسافت آفیس اکسل ۲۰۱۳ صورت پذیرفته است.



شکل ۱. ساختار اورتو هیدروکسی بازهای شیف.

۳. نتایج و بحث

۳-۱. اساس AIM و تجزیه و تحلیل آن

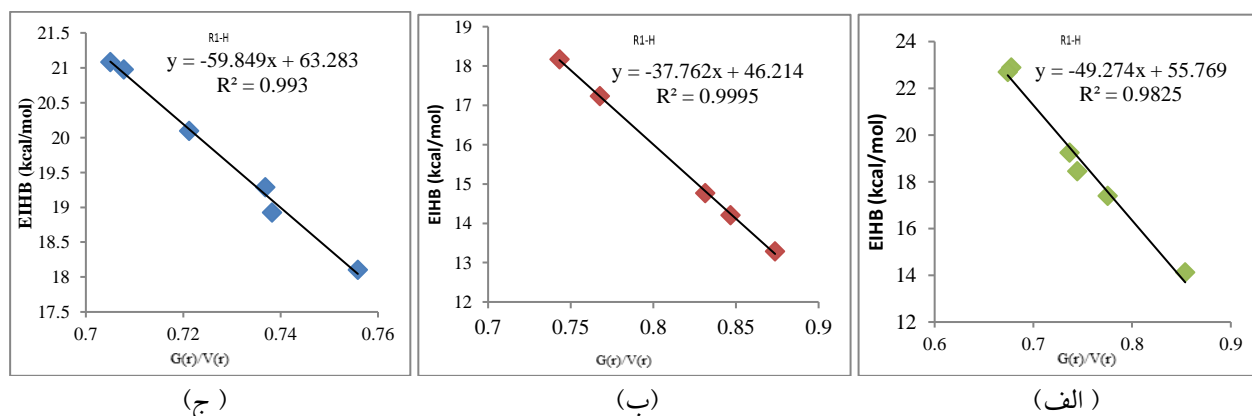
پارامترهای توپولوژیکی AIM مربوط به دو اتم مجاور در محیط شیمیایی به ماهیت نقطه بحرانی بین آنها بستگی دارد و ماهیت پیوندهای شیمیایی در یک مولکول به چگالی الکترونی در این نقطه بحرانی بستگی دارد. چگالی، $\rho(r)$ و کمیت لاپلاسی مربوط به آن، $\nabla^2\rho(R)$ ، دو پارامتر مهم نقطه بحرانی است. رابطه بین لاپلاسی و پارامترهای توپولوژیکی نظریه ویریا عبارت است از:

$$\frac{1}{4}\nabla^2\rho(r) = 2G(r) + V(r)$$

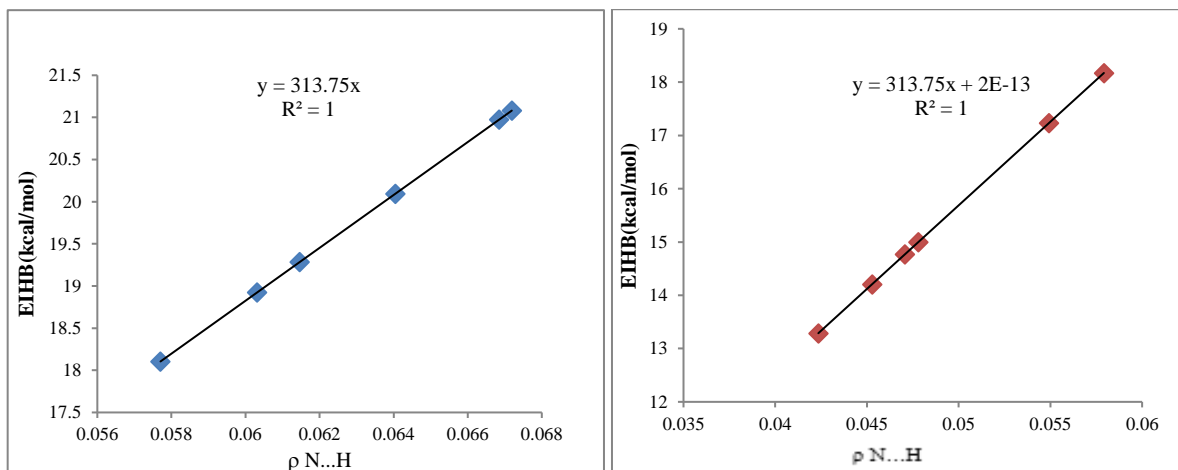
که در آن $G(r)$ و $V(R)$ به ترتیب انرژی های جنبشی و پتانسیل چگالی الکترونی در نقاط بحرانی هستند. برای تعیین قدرت IHB، یافتن نقاط بحرانی پیوند هیدروژنی (RCP, BCP) ضروری و سودمند است. مقادیر کمی $\rho(r)$ و $\nabla^2\rho(R)$ برای پیوند هیدروژنی در RCP, BCP می تواند ماهیت IHB را به نمایش گذارد. E_{IHB} با رابطه زیر تعریف می شود:

$$E_{IHB} = -\frac{1}{2}V(R)$$

در شکل ۲ ارتباط بین E_{IHB} با $G(rBCP) / V(rBCP)$ نشان داده شده است و در نمودار شکل ۳ و ۴، E_{IHB} در مقابل طول پیوند N-H و RCP رسم شده است. یک رابطه خطی بسیار خوب بین E_{IHB} و $G(rBCP) / V(rBCP)$ (با حذف SH در موقعیت R1) و دانسیته الکترونی کل (با حذف SH در موقعیت R1 و R^2 در $N(CH_3)_2$) و لاپلاسی آنها به دست آمده است. در مقابل انرژی IHB رابطه خطی خوبی را با لاپلاسی در موقعیت R^2 نشان نمی دهد، مگر اینکه $N(CH_3)_2$ حذف شود، که ضریب رگرسیون آن در حدود ۰/۶-۰/۷ است.

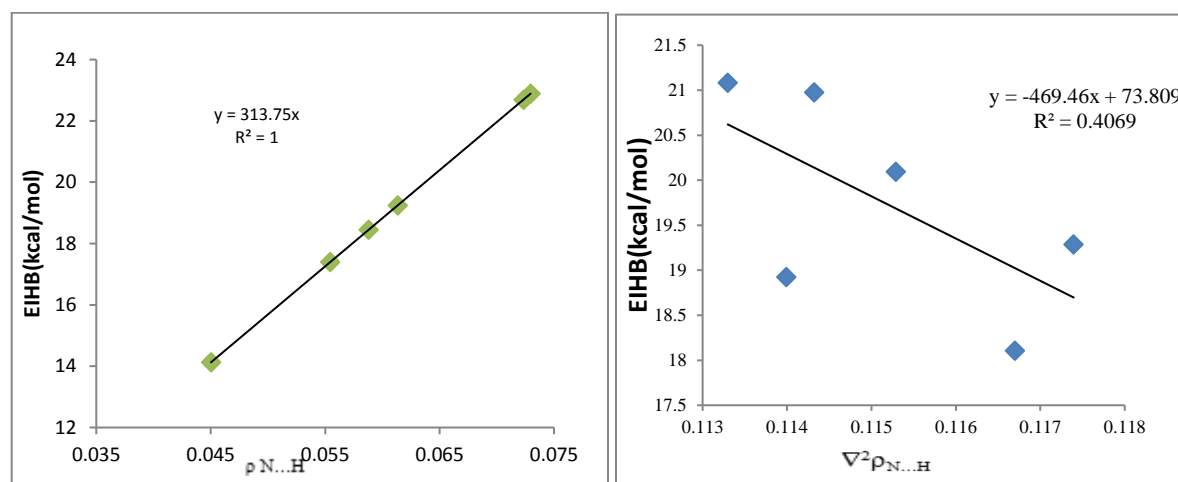


شکل ۲. بستگی E_{IHB} به GVR در استخلاف های (الف) R^2 (ب) R^1 و (ج) R^1R^2



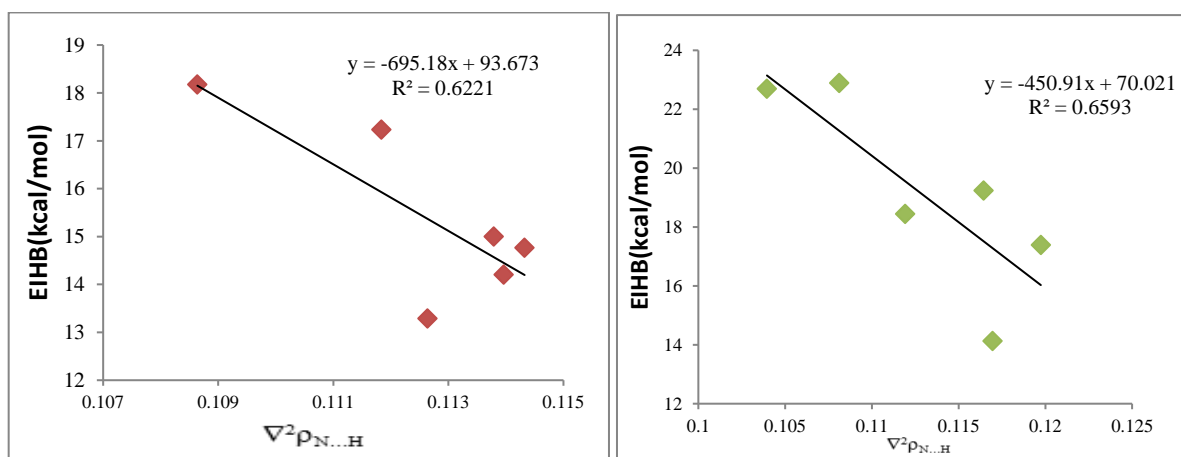
(ب)

(الف)



(د)

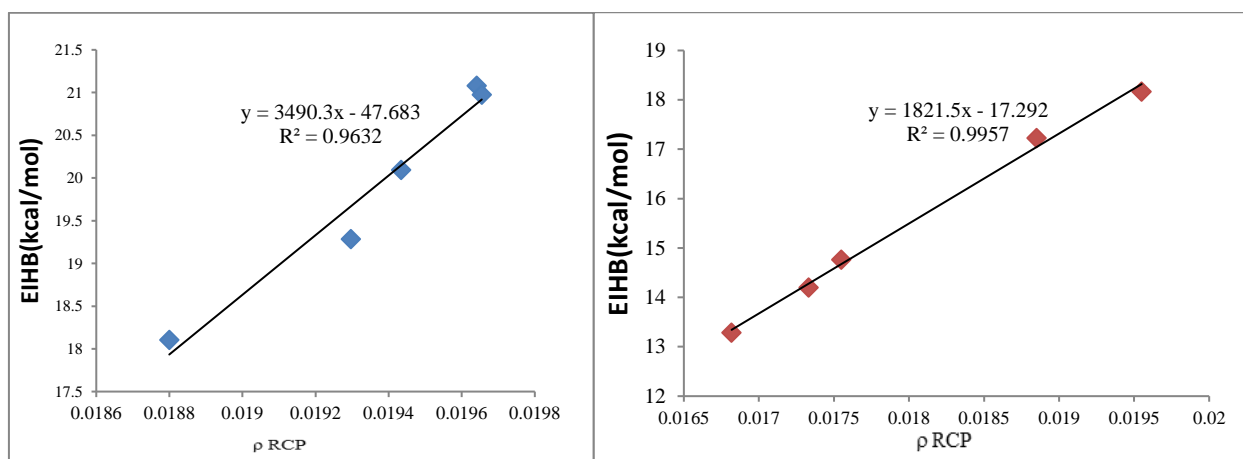
(ج)



(و)

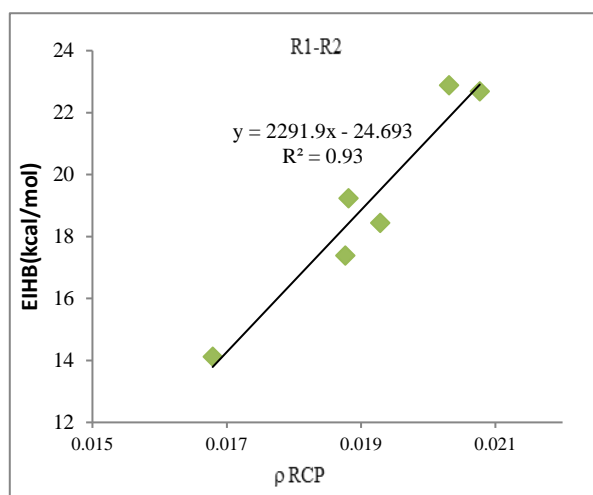
(هـ)

شکل ۳. بستگی EIHB با ρ N...H (الف) در استخلافات R² (ب) در استخلافات R¹ (ج) در استخلافات R¹R² و با ∇² ρ (د) در استخلافات R² (هـ) در استخلافات R¹ (و) در استخلافات R¹R²

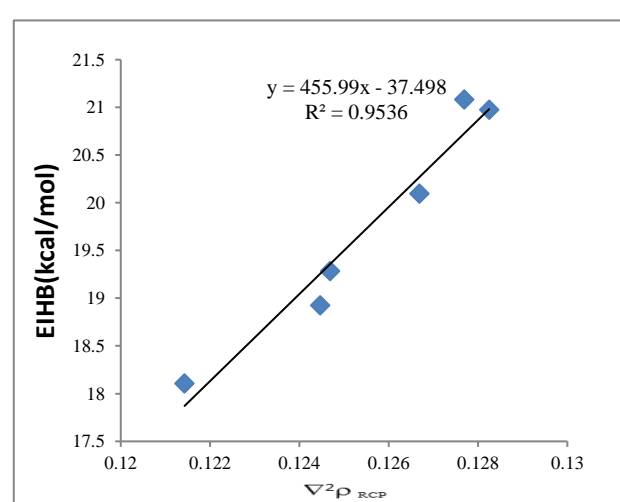


(ب)

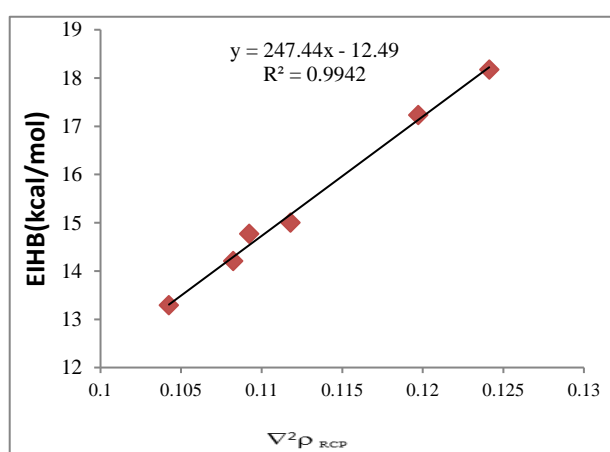
(الف)



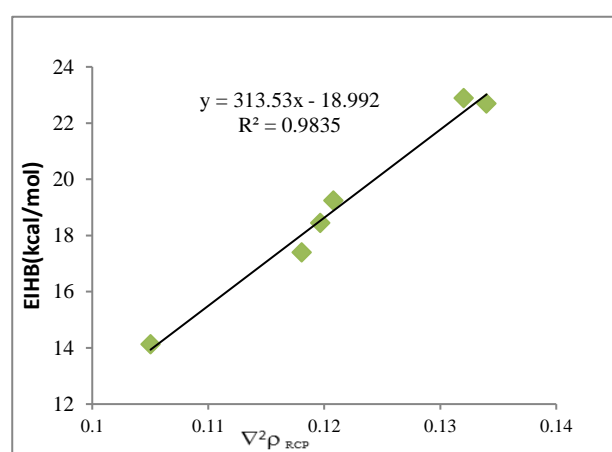
(د)



(ج)



(و)



(ه)

شکل ۴. بستگی E_{IHB} به (الف) چگالی الکترونی کل در نقطه بحرانی (ب) لاپلاسیان چگالی کل الکترونی در نقطه بحرانی در استخلاف های $\text{N}(\text{CH}_3)$, NH_2

OH , SH , CH_3 , SiH_3 اورتو-هیدروکسی شیف بازها

۲-۳. تجزیه و تحلیل ساختاری

مقادیر ساختاری بیانگر خواص فیزیکی و شیمیایی IHB است که به روش های متفاوتی بیان می شود. مقادیر پارامترهای ساختاری آنها در جدول ۱ داده شده است. مهم ترین پارامترهایی که در این جدول مورد توجه قرار گرفته اند طول پیوند C-O، C=C، C-C، C-N، فاصله N...H، N...O و زاویه N...H-O است. در شکل ۵ الف-و، این بستگی را برای استخلاف های موقعیت های R^1 ، R^2 و $R^{1,2}$ نشان می دهد. همبستگی بین انرژی IHB با طول پیوندهای N...H، N...O، N...H+H-O، و زاویه N...H-O وجود دارد. برای R^1 ضرایب رگرسیون خطی برای همه آنها ۱/۰۰ است.

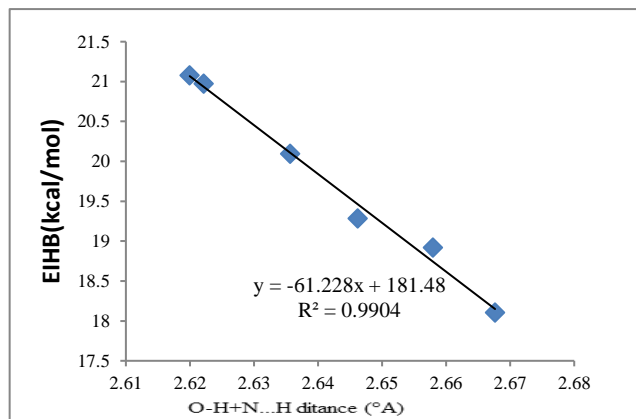
جدول ۱. پارامترهای توپولوژیکی و انرژی پیوند هیدروژنی محاسبه شده در سطح B3LYP/6-311++G** برای نقطه BCP

R_1, R_2	ρ N...H	$\nabla^2\rho$ N...H	$V(r)$ N...H	$G(r)$ N...H	$-G(r)/V(r)$ N...H	E_{IHB}
H,H	0.05572	0.11433	-0.05402	0.04130	0.76456	17.48292
H,N(CH ₃)	0.06031	0.11399	-0.05981	0.04415	0.73823	18.92262
N(CH ₃),H	0.04706	0.11432	-0.04313	0.03586	0.83135	14.76583
N(CH ₃),N(CH ₃)	0.05879	0.11193	-0.05728	0.04263	0.74427	18.44653
H,NH ₂	0.06719	0.11330	-0.06908	0.04870	0.70502	21.08071
NH ₂ ,H	0.04528	0.11396	-0.04109	0.03479	0.84664	14.20557
NH ₂ ,NH ₂	0.06133	0.11644	-0.06155	0.04533	0.73649	19.24213
H,OH	0.05770	0.11670	-0.05701	0.04309	0.75586	18.10490
OH,H	0.04235	0.11264	-0.03768	0.03292	0.87368	13.28782
OH,OH	0.04502	0.11696	-0.04132	0.03528	0.85384	14.12431
H-SH	0.06146	0.11740	-0.06196	0.04565	0.73683	19.28464
SH-H	0.04780	0.11379	-0.04412	0.02560	0.58018	14.99763
SH-SH	0.05543	0.11974	-0.05439	0.04216	0.77519	17.39213
H,CH ₃	0.06685	0.11432	-0.06877	0.04867	0.70780	20.97479
CH ₃ ,H	0.05492	0.11184	-0.05243	0.04025	0.76766	17.23213
CH ₃ ,CH ₃	0.07295	0.10813	-0.07611	0.05157	0.67760	22.88788
H,SiH ₃	0.06405	0.11529	-0.06516	0.04699	0.72117	20.09467
SiH ₃ ,H	0.05792	0.10864	-0.05585	0.04150	0.74316	18.17120
SiH ₃ ,SiH ₃	0.07232	0.10395	-0.07469	0.05034	0.67398	22.69178

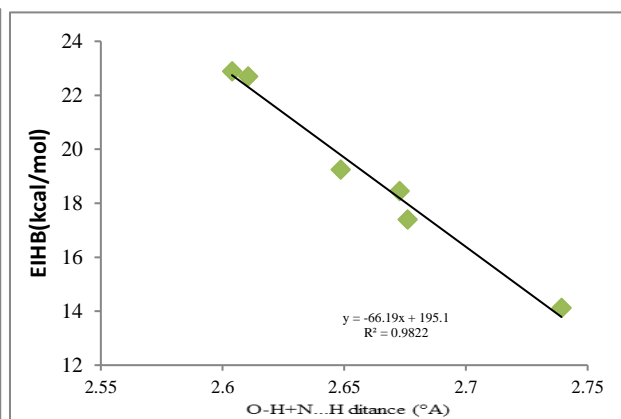
مقادیر ۰/۹۹۷۷، ۰/۹۶۸۸، ۰/۹۹۰۴ و ۰/۷۲۶۶ به ترتیب ضرایب همبستگی خطی انرژی پیوند هیدروژنی با طول پیوندهای N...H، N...O، N...H+H-O و زاویه N...H-O برای موقعیت R^2 است و برای موقعیت $R^{1,2}$ این ضرایب همبستگی خطی به ترتیب ۰/۹۹۳۳، ۰/۹۵۵۸، ۰/۹۸۲۲ و ۰/۹۵۷۹ است.

تمام این ضرایب همبستگی خطی بدون در نظر گرفتن مولکول پایه است. همانطور که در شکل ۵ الف-و نشان داده شده است. انرژی IHB با RN...H و RN...H+RO-H بستگی بهتری نشان می دهد تا با N...O. این امر گویای آن است که پیوند هیدروژنی در سیستم های خمیده فاصله اتمهای دهنده و گیرنده نیست بلکه جمع فواصل این دو اتم با اتم هیدروژن است. شکل ۵ نشان می دهد بزرگترین

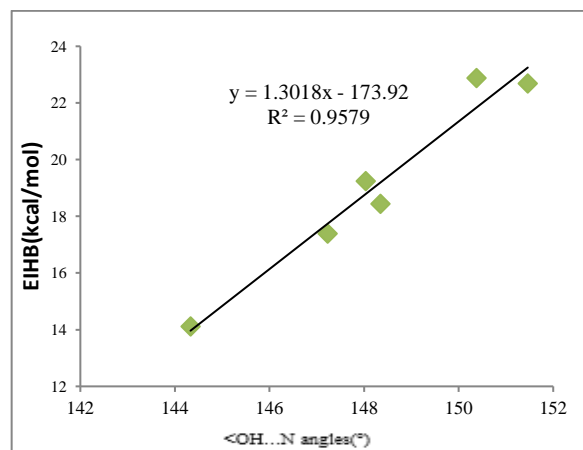
زاویه N...H-O برای موقعیت $R^{1,2}$ و کوچکترین آن در ارتباط با موقعیت R^2 است. طبق جدول ۲ طول پیوندهای d1، d2، d3، و d4 با جایگزین کردن گروه های دهنده تغییر کردند.



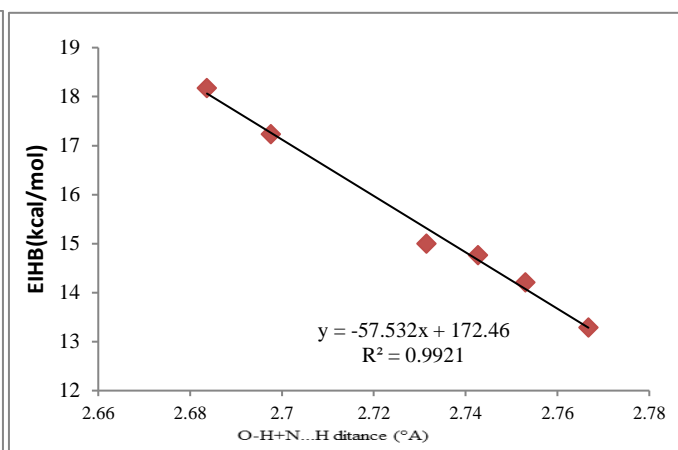
(ب)



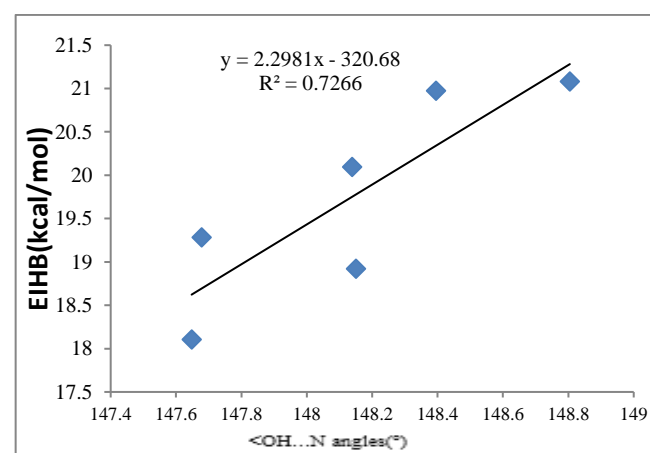
(الف)



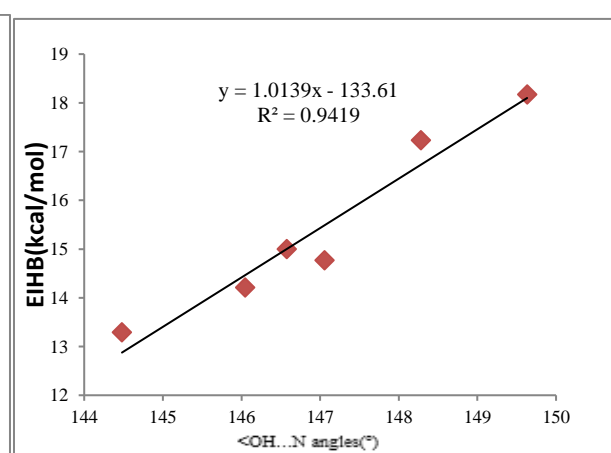
(د)



(ج)



(و)



(ه)

شکل ۵. بستگی E_{HB} به (الف) چگالی کل الکترونی N...H در نقطه BCP (ب) چگالی کل الکترونی در N...O در نقطه BCP (ج) چگالی کل الکترونی OH + HN در نقطه BCP (د) پارامترهای هندسی ساختاری در استخلافهای N(CH₃), NH₂, OH, SH, CH₃, SiH₃، اورتو-هیدروکسی-شیف بازها

جدول ۲. پارامترهای ساختاری (فاصله بر حسب Å و زاویه بر حسب درجه) محاسبه شده در سطح B3LYP/6-311++G**

R ¹ ,R ²	d1(OC)	d2(CC)	d3(CC)	d4(NC)	OH	N...H	OH+NH	<OH...N	N-O
H,H	1.335	1.404	1.449	1.288	1.002	1.016	2.018	147.569	2.585
H,N(CH ₃) ₂	1.336	1.403	1.480	1.298	1.005	1.653	2.658	148.150	2.562
N(CH ₃) ₂ ,H	1.347	1.399	1.456	1.294	0.988	1.755	2.743	147.057	2.639
N(CH ₃) ₂ ,N(CH ₃) ₂	1.339	1.403	1.483	1.306	1.002	1.670	2.673	148.350	2.578
H,NH ₂	1.332	1.405	1.474	1.297	1.013	1.607	2.620	148.805	2.529
NH ₂ ,H	1.345	1.400	1.454	1.286	0.987	1.766	2.753	146.048	2.643
NH ₂ ,NH ₂	1.337	1.403	1.474	1.303	1.004	1.644	2.649	148.036	2.552
H,OH	1.335	1.405	1.457	1.300	1.001	1.666	2.668	147.648	2.569
OH,H	1.345	1.399	1.452	1.284	0.984	1.783	2.767	144.480	2.646
OH,OH	1.345	1.398	1.462	1.295	0.984	1.755	2.739	144.330	2.618
H,SH	1.332	1.408	1.465	1.287	1.003	1.643	2.646	147.678	2.548
SH,H	1.342	1.401	1.451	1.290	0.990	1.742	2.732	146.574	2.625
SH,SH	1.339	1.406	1.471	1.294	0.992	1.684	2.676	147.232	2.575
H,CH ₃	1.332	1.408	1.467	1.294	1.011	1.611	2.622	148.395	2.528
CH ₃ ,H	1.337	1.402	1.452	1.283	1.001	1.696	2.698	148.282	2.602
CH ₃ ,CH ₃	1.332	1.408	1.472	1.293	1.018	1.586	2.604	150.379	2.522
H,SiH ₃	1.332	1.409	1.462	1.299	1.008	1.628	2.636	148.138	2.540
SiH ₃ ,H	1.332	1.406	1.446	1.291	1.006	1.677	2.684	149.632	2.596
SiH,SiH ₃	1.327	1.413	1.461	1.303	1.020	1.591	2.611	151.462	2.534

۴. نتیجه گیری

هندسه اورتو- هیدروکسی بازهای شیف و گروه های الکترون دهنده در بالاترین سطح در B3LYP/6-311++G** گذاشته شدند. از میزان رزونانس الکترون های π به وجود IHB و پارامترهای توپولوژیکی که از تئوری بیدر به دست می آیند و پارامترهای ساختاری اندازه گیری می شود. تمام تکنیک ها برای استخلاف های گروه های دهنده در موقعیت R¹ (بدون SiH₃) و موقعیت R^{1,2} (برای SH و OH) باعث کاهش نیرو IHP می شود. در نتیجه استخلاف های تمام گروه های دهنده در این شرایط بر روی IHB اثر دارند. قدرت پیوند هیدروژنی مولکول پایه نسبت به قدرت IHB در تمام مشتقات استخلاف شده در موقعیت R² کمتر است. افزایش میزان پیوند هیدروژنی در مشتقات SiH₃ در هر موقعیتی که باشند به علت خواص الکترون دهندگی ضعیف آنها است. در نتیجه، به تبع آن جانشینی گروه دهنده در موقعیت R² و موقعیت R¹ (برای SiH₃) و موقعیت R^{1,2} (برای N(CH₃)₂، NH₂، CH₃، SiH₃) باعث افزایش در قدرت پیوند هیدروژنی در تمام مشتقات جایگزین شده است.

۵. مراجع

[1] Yamada, S., Advancement in stereochemical aspects of Schiff base metal complexes. *Coordination Chemistry Reviews*, 190 (1999) 537-555.

- [2] Lin, Y.L. and Gao, J., Internal proton transfer in the external pyridoxal 5'-phosphate Schiff base in dopa decarboxylase. *Biochemistry*, 49(1)(2009) 84-94.
- [3] Gallant, A.J., Yun, M., Sauer, M., Yeung, C.S. and MacLachlan, M.J., Tautomerization in Naphthalenediimines: A Keto-Enamine Schiff Base Macrocycle. *Organic letters*, 7(22)(2005) 4827-4830.
- [4] Beyramabadi, S.A., Morsali, A., Vahidi, S.H., Khoshkholgh, M.J. and Esmaili, A.A., N, N'-dipyridoxyl (ethylenediamine) schiff-base ligand and its square-pyramidal copper (II) complex: Synthesis, experimental and theoretical characterization. *Journal of Structural Chemistry*, 53(3)(2012) 460-467.
- [5] Eshtiagh-Hosseini, H., Housaindokht, M.R., Beyramabadi, S.A., Tabatabaei, S.H.M., Esmaili, A.A. and Khoshkholgh, M.J., Synthesis, experimental and theoretical characterization of N, N'-dipyridoxyl (1, 4-butanediamine) Schiff-base ligand and its Cu (II) complex. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 78(3)(2011) 1046-1050.
- [6] Kumar, P.P. and Rani, B.L., Synthesis and characterization of new Schiff bases containing pyridine moiety and their derivatives as antioxidant agents. *Int J Chem Tech Research*, 3 (2011)155-160.
- [7] Hatefi, M., Moghadam, M., Mirkhani, V. and Sheikhshoaei, I., Silica supported Ru (salophen) Cl: An efficient and robust heterogeneous catalyst for epoxidation of alkenes with sodium periodate. *Polyhedron*, 29(15)(2010) 2953-2958.
- [8] Rezaeifard, A., Sheikhshoaei, I., Monadi, N. and Alipour, M., Synthesis, characterization and pronounced epoxidation activity of cis-dioxo-molybdenum (VI) tridentate Schiff base complexes using tert-butyl hydroperoxide. *Polyhedron*, 29(13)(2010) 2703-2709.
- [9] Seyedi, S.M., Sandaroos, R. and Zohuri, G.H., Novel cobalt (II) complexes of amino acids-Schiff bases catalyzed aerobic oxidation of various alcohols to ketones and aldehyde. *Chinese Chemical Letters*, 21(11)(2010) 1303-1306.
- [10] Yin, L., Jia, X., Li, X.S. and Chan, A.S., Simply air: Vanadium-catalyzed oxidative kinetic resolution of methyl o-chloromandelate by ambient air. *Chinese Chemical Letters*, 21(7)(2010) 774-777.
- [11] Yang, Y.L., Wan, N.N., Wang, W.P., Xie, Z.F. and De Wang, J., Synthesis of bis (indolyl) methanes catalyzed by Schiff base-Cu (II) complex. *Chinese Chemical Letters*, 22(9)(2011) 1071-1074.
- [12] Fuh, A.Y.G., Chen, Y.D., Liu, C.K. and Cheng, K.T., Azo dye adsorption effect induced by elliptically polarized light in azo dye-doped liquid crystals. *Dyes and Pigments*, 92(3)(2012) 949-953.
- [13] Lee, W., Yuk, S.B., Choi, J., Jung, D.H., Choi, S.H., Park, J. and Kim, J.P., Synthesis and characterization of solubility enhanced metal-free phthalocyanines for liquid crystal display black matrix of low dielectric constant. *Dyes and Pigments*, 92(3)(2012) 942-948.
- [14] Alwan, S.M., Synthesis and preliminary antimicrobial activities of new arylideneamino-1, 3, 4-thiadiazole-(thio/dithio)-acetamido cephalosporanic acids. *Molecules*, 17(1)(2012) 1025-1038.
- [15] Mohammed, I.A. and Hamidi, R.M., Synthesis of new liquid crystalline diglycidyl ethers. *Molecules*, 17(1)(2012) 645-656.
- [16] Badrey, M.G. and Gomha, S.M., 3-Amino-8-hydroxy-4-imino-6-methyl-5-phenyl-4, 5-dihydro-3H-chromeno [2, 3-d] pyrimidine: An efficient key precursor for novel synthesis of some interesting triazines and triazepines as potential anti-tumor agents. *Molecules*, 17(10)(2012) 11538-11553.
- [17] Menati, S., Azadbakht, A., Azadbakht, R., Taeb, A. and Kakanejadifard, A., Synthesis, characterization, and electrochemical study of some novel, azo-containing Schiff bases and their Ni (II) complexes. *Dyes and Pigments*, 98(3)(2013) 499-506.
- [18] Zhang, P., Shi, B.B., Wei, T.B., Zhang, Y.M., Lin, Q., Yao, H. and You, X.M., A naphtholic Schiff base for highly selective sensing of cyanide via different channels in aqueous solution. *Dyes and Pigments*, 99(3)(2013) 857-862.

- [19] Xie, Y.Z., Shan, G.G., Li, P., Zhou, Z.Y. and Su, Z.M., A novel class of Zn (II) Schiff base complexes with aggregation-induced emission enhancement (AIEE) properties: synthesis, characterization and photophysical/electrochemical properties. *Dyes and Pigments*, 96(2)(2013) 467-474.
- [20] Zabulica, A., Balan, M., Belei, D., Sava, M., Simionescu, B.C. and Marin, L., Novel luminescent phenothiazine-based Schiff bases with tuned morphology. Synthesis, structure, photophysical and thermotropic characterization. *Dyes and Pigments*, 96(3)(2013) 686-698.
- [21] Garnovskii, A.D., Nivorozhkin, A.L. and Minkin, V.I., Ligand environment and the structure of Schiff base adducts and tetracoordinated metal-chelates. *Coordination chemistry reviews*, 126(1-2)(1993) 1-69.
- [22] Niaz, M. and Abdolreza, R., Methanoldioxido {1-[(2RS)-(2-oxidopropyl) iminomethyl]-2-naphtholato} molybdenum (VI). *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*, 66(2)(2010) m202-m202.
- [23] I. Sheikshoae, S.Y. Ebrahimipour, M.W Sheikshoae, J. Sci. & Tech. 9 (2012) 207-216.
- [24] Niederhoffer, E.C., Timmons, J.H. and Martell, A.E., Thermodynamics of oxygen binding in natural and synthetic dioxygen complexes. *Chemical Reviews*, 84(2)(1984) 137-203.
- [25] Zhang, W., Loebach, J.L., Wilson, S.R. and Jacobsen, E.N., Enantioselective epoxidation of unfunctionalized olefins catalyzed by salen manganese complexes. *Journal of the American Chemical Society*, 112(7)(1990) 2801-2803.
- [26] Wu, Z., Wu, Z.K., Tang, H., Tang, L.J. and Jiang, J.H., Activity-based DNA-gold nanoparticle probe as colorimetric biosensor for DNA methyltransferase/glycosylase assay. *Analytical chemistry*, 85(9)(2013) 4376-4383.
- [27] Loget, G., Wood, J.B., Cho, K., Halpern, A.R. and Corn, R.M., Electrodeposition of polydopamine thin films for DNA patterning and microarrays. *Analytical chemistry*, 85(21)(2013) 9991-9995.
- [28] Albayrak, Ç., Koşar, B., Demir, S., Odabaşoğlu, M. and Büyükgüngör, O., Synthesis, spectroscopic, molecular and computational structure characterizations of (E)-2-ethoxy-6-[(phenylimino) methyl] phenol. *Journal of Molecular Structure*, 963(2)(2010) 211-218.
- [29] Petek, H., Albayrak, Ç., Odabaşoğlu, M., Şenel, İ. and Büyükgüngör, O., Crystallographic and conformational analysis of [(Z)-2-ethoxy-6-[(2-hydroxyphenylamino) methylene] cyclohexa-2, 4-dienone]. *Journal of Chemical Crystallography*, 38(12)(2008) 901-905.
- [30] Tayyari, S.F., Najafi, A., Afzali, R., Emamian, S. and Wang, Y.A., Structure and vibrational assignment of the enol form of 1-chloro-1, 1-difluoro-pentane-2, 4-dione. *Journal of Molecular Structure*, 878(1)(2008) 10-21.
- [31] Tanak, H., Bingöl Alpaslan, Y., Yavuz, M., Açar, E., Erşahin, F. and Büyükgüngör, O., 2-[(2, 4-Dimethylphenyl) iminomethyl]-3, 5-dimethoxyphenol. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*, 65(7)(2009) o1572-o1572.
- [32] Gaussian 09, Revision A.02, Frisch, M.J., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., Robb, M.A., Cheeseman, J.R., Scalmani, G., Barone, V., Mennucci, B., Petersson, G.A., Nakatsuji, H., Caricato, M., Li, X., Hratchian, H.P., Izmaylov, A.F., Bloino, J., Zheng, G., Sonnenberg, J.L., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Vreven, T., Montgomery, J. A., Peralta, J. E., Ogliaro, F., Bearpark, M., Heyd, J.J., Brothers, E., Kudin, K.N., Staroverov, V.N., Kobayashi, R., Normand, J., Raghavachari, K., Rendell, A., Burant, J.C., Iyengar, S.S., Tomasi, J., Cossi, M., Rega, N., Millam, J.M., Klene, M., Knox, J.E., Cross, J.B., Bakken, V., Adamo, C., Jaramillo, J., Gomperts, R., Stratmann, R.E., Yazyev, O. Austin, A.J., Cammi, R., Pomelli, C., Ochterski, J.W., Martin, R.L., Morokuma, K., Zakrzewski, V.G., Voth, G.A., Salvador, P., Dannenberg, J.J., Dapprich, S., Daniels, A.D., Farkas, O., Foresman, J.B., Ortiz, J.V., Cioslowski, J., and Fox, D.J., *Gaussian, Inc., Wallingford CT, (2009)*.
- [33] Biegler-König, F., Schönbohm, J., Derdau, R., Bayles, D. and Bader, R.F.W., AIM2000, version 2.0. *McMaster University (2002)*.

- [34] Bader, R.F., Tang, T.H., Tal, Y. and Biegler-Koenig, F.W., Properties of atoms and bonds in hydrocarbon molecules. *Journal of the American Chemical Society*, 104(4)(1982) 946-952.
- [35] Glendening, E.D., Badenhoop, J.K., Reed, A.E., Carpenter, J.E., Bohmann, J.A., Morales, C.M. and Weinhold, F., NBO 5.0 Program. *Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin: Madison, WI, USA* (2001).
- [36] McWeeny, R., Perturbation theory for the Fock-Dirac density matrix. *Physical Review*, 126(3)(1962) 1028.
- [37] Pakiari, A.H. and Eskandari, K., The chemical nature of very strong hydrogen bonds in some categories of compounds. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 759(1)(2006) 51-60.
- [38] Nowroozi, A., Raissi, H. and Farzad, F., The presentation of an approach for estimating the intramolecular hydrogen bond strength in conformational study of β -Aminoacrolein. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 730(1)(2005) 161-169.
- [39] Trendafilova, N., Bauer, G. and Mihaylov, T., DFT and AIM studies of intramolecular hydrogen bonds in dicoumarols. *Chemical physics*, 302(1)(2004) 95-104.
- [40] Tayyari, S.F., Moosavi-Tekyeh, Z., Zahedi-Tabrizi, M., Eshghi, H., Emampour, J.S., Rahemi, H. and Hassanpour, M., Intramolecular hydrogen bonding in 2-nitromalonaldehyde: Infrared spectrum and quantum chemical calculations. *Journal of molecular structure*, 782(2)(2006) 191-199.

