



بررسی قدرت پیوند هیدروژنی، مطالعات کنفورمیری و تجزیه و تحلیل طیف ارتعاشی در مولکول ۳-اگزو-۳-فنیل-پروپیونیک اسید متیل استر

فرزانه سادات بحری*، سیروس سالمی

دانشگاه حکیم سبزواری، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی، سبزواری، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۹۰/۱۰/۳۰، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۹۰/۱۲/۱۸، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۹۱/۲/۱

چکیده

مولکول ۳-اگزو-۳-فنیل-پروپیونیک اسید متیل استر دارای نام تجاری متیل ۳-اگزو-۳-فنیل پروپانوات (MOPP) است. تجزیه و تحلیل صورتبندی های این مولکول با استفاده از محاسبات نظریه تابع چگالی در سطوح محاسباتی B3LYP/6-311G**, B3LYP/6-311G** و MP2/6-311G** به طور کامل انجام پذیرفته است. نتایج محاسباتی برای ترکیب مذکور با مولکول بنزویل استون (BA) مقایسه شده است. انرژی پیوند هیدروژنی درون مولکولی ۶۰/۲۹ kJ/mol محاسبه شده است. مقایسه پارامترهای ساختاری ترکیب MOPP با BA نشان می دهد قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی در MOPP نسبت به BA ضعیف تر است. این نتیجه در توافق خوبی با جابه جایی شیمیایی پروتون در طیف سنجی NMR و فرکانس ارتعاشی گروه OH که در سطح محاسباتی B3LYP/6-311G** محاسبه شده است، می باشد.

واژه های کلیدی: پیوند هیدروژنی درون مولکولی، β -دی کربونیل، تئوری تابع چگالی (DFT).

۱. مقدمه

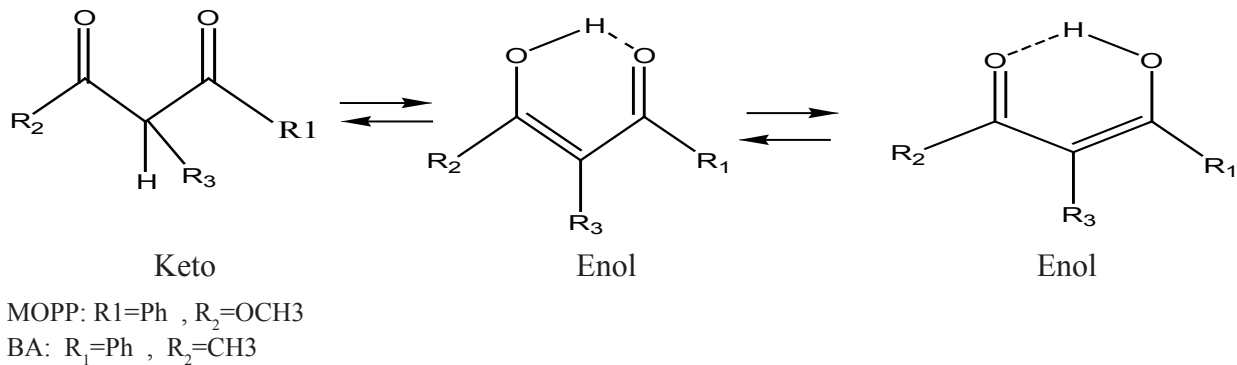
پایداری مولکول ایفا می کنند. بتا دی کتون ها یکی از معروف ترین شاخه های ترکیبات تاتومری اند، کاربردهای فراوان در شیمی آلی و معدنی دارند. با دانستن تاتومری بین فرم های کتون و انول، به راحتی می توان تشخیص داد که یک بتا دی کتون می تواند از دو مسیر مختلف با دو شکل انولی متفاوت در تعادل باشد. شکل ۱ این تاتومری را بین

به دلیل اهمیت فوق العاده زیاد و نقش حیاتی پیوند هیدروژنی در بسیاری از سیستم های طبیعی اعم از بیولوژیکی و بیوشیمیایی عنوان بسیاری از تحقیقات پی گیر و روزافزون را به خود اختصاص داده است. پیوند هیدروژنی درون مولکولی در ترکیباتی که استعداد چنین پیوندی را داشته باشند، نقش بسیار مهمی در شکل گیری و

* عهده دار مکاتبات: فرزانه سادات بحری

نشانی: دانشگاه حکیم سبزواری، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی، سبزواری، ایران.

تلفن: ۰۵۷۱-۴۰۰۳۱۷۰ پست الکترونیکی: f_s_bahry@yahoo.com



شکل ۱. تاتومری کتونول

۲. روش های محاسباتی

تمام محاسبات کوانتومی انجام شده در این کار توسط نرم افزار گوسین ۹۸ (Revision-A.7) انجام پذیرفته است. تمامی پیکربندی های فرم کتو، پیکربندی های فرم انولی (I) همراه با ساختار باز (II) مربوط به آنها در سطوح $B3LYP/6-311++G^{**}$ ، $MP2/6-311G^{**}$ ، $B3LYP/6-311G^{**}$ بهینه شده اند.

محاسبات فرکانس ارتعاشی و طیف NMR برای پایدارترین کنفورمر انولی در سطح $B3LYP/6-311++G^{**}$ انجام شده است.

۳. نتایج و بحث

۳-۱. پیکربندی و پایداری نسبی

ترکیبات بتا دی کربونیل عمدتاً به شکل سیس انولی هستند. زیرا در این حالت توسط پیوند هیدروژنی درون مولکولی پایدار می گردند. از لحاظ نظری برای مولکول MOPP بیست و شش کنفورمر انولی می توان در نظر گرفت. ساختار این کنفورمرهای انولی به همراه انرژی نسبی ساختار کی لیت (I) و باز (II) (با تغییر زاویه دای هدرال C=C—O—H از صفر به ۱۸۰° به دست می آید) محاسبه شده در سطح $MP2/6-311G^{**}$ بر حسب kJ/mol به همراه سیستم شماره گذاری اتم ها در شکل ۲ نشان داده شده اند.

از میان پیکربندی های سیس انول مولکول MOPP که قادر به برقراری پیوند هیدروژنی هستند، تنها سه پیکربندی E_1 ، E_2 ، E_4 پایدار و پیکربندی E_3 در اثر بهینه کردن ساختار در سطح محاسباتی $B3LYP/6-311++G^{**}$ به پیکربندی E_1 تبدیل می شود.

انرژی های الکترونی محاسبه شده بر حسب واحد هارتری برای پیکربندی های انولی مولکول MOPP که پیوند هیدروژنی درون

فرم کتو و دو فرم انولی متفاوت نشان می دهد. در گونه های سیس-انولی به دلیل ساختمان و شکل مناسبی که مولکول دارد، این امکان برای اتم هیدروژن گروه هیدروکسیل (O—H) فراهم می شود تا با یک فاصله و زاویه مناسب در جهت اکسیژن گروه کربونیل (C=O) قرار گرفته و با تشکیل یک پیوند هیدروژنی درون مولکولی باعث پایداری ساختار سیس-انول گردد [۱-۲].

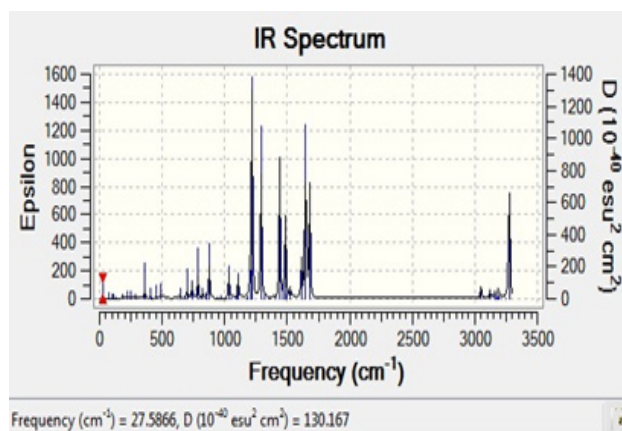
تشکیل پیوند هیدروژنی سبب افزایش رزونانس الکترون های π سیستم مزدوج شده و لذا تمایلی برای یکسان شدن مرتبه پیوندی، در پیوندهای والانس حلقه کی لیتی شش عضوی خواهد شد. بنابراین با توجه به ساختار الکترونی حلقه کیلیتی به نظر می رسد هر پارامتری که در چگالی الکترونی حلقه کیلیتی موثر باشد، می تواند در قدرت پیوند هیدروژنی موثر بوده و قدرت آن را تغییر دهد. بنابراین خواص الکترونی و ویژگی های فضایی R_1 ، R_2 ، R_3 با تاثیر بر خواص الکترونی و ساختار هندسی حلقه می تواند باعث تغییر تاتومر پایدارتر و تغییر قدرت پیوند گردند [۳-۴]. مطالعات تجربی متعددی نشان داده اند که گروه الکترون کشنده مثل تری فلورو متیل در موقعیت های بتا (R_1 ، R_2) پیوند را تضعیف کرده، در حالی که گروه تامین کننده الکترون مثل فنیل قدرت پیوند را افزایش می دهند [۵-۶].

قدرت پیوند هیدروژنی از نظر ساختاری توسط پارامترهایی از قبیل فاصله بین دو اتم الکترون گاتیو (O...O)، طول پیوند هیدروژنی (H...O)، طول پیوند (O—H) و زاویه پیوند OHO مشخص می گردد. هدف از این مقاله اندازه گیری قدرت پیوند هیدروژنی MOPP و مقایسه پارامترهای ساختاری و پارامترهای جیلی ترکیب مذکور با BA است.

اصلی حلقه انولی و پارامترهای جیلی این مولکول و BA داده شده است. پارامترهای جیلی شامل q_1 ، q_2 ، Q ، $Q=(q_1+q_2)$ و $\lambda=(1-Q/0.32)/2$ است.

طول پیوند می باشد. با افزایش قدرت پیوند هیدروژنی، غیر مستقر شدن الکترون های π در حلقه کی لیتی بیشتر شده و مقدار q_1 و q_2 به صفر نزدیک می شود. بدیهی است در ساختارهایی که در آن ها عدم استقرار الکترون های π کامل باشد، q_1 و q_2 برابر صفر می شوند [۷].

با توجه به جدول ۲ می توان به طور نسبی قدرت پیوند هیدروژنی را در MOPP نسبت به BA پیشگویی نمود [۸]. بر طبق جدول وجود گروه متوکسی در MOPP باعث کاهش قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی نسبت به BA شده است. به علت الکترون گاتیوی اکسیژن در گروه متوکسی باعث کاهش دانسیته الکترون های π در حلقه کی لیتی MOPP می شود. طول پیوند های C=O و C=C در پایدارترین کنفورمر مولکول MOPP (E_1) کمتر از BA است، و طول پیوند C-O در E_1 بیشتر از BA است. این تغییر طول پیوند ها در نتیجه تفاوت میزان رزونانس ایجاد می شود، در BA میزان رزونانس بیشتر از MOPP است و پارامترهای جیلی q_1 و q_2 در BA مقادیر کمتری دارند. طول پیوند O—H در مولکول فوق نسبت به BA کاهش یافته است و طول پیوند



شکل ۲. طیف ارتعاشی پایدارترین کنفورمر ترکیب MOPP محاسبه شده در تابع پایه B3LYP/6-311G**.

مولکولی دارند، اختلاف انرژی بین فرم انولی با پایدارترین پیکربندی (E_1) بر حسب kJ/mol که با ΔE نمایش می دهیم و همچنین اختلاف دو شکل سیس (I) و ترانس (II) برای هر پیکربندی که آن را قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی (E_{HB}) می نامیم که بر حسب kJ/mol برای مولکول MOPP در سطوح محاسباتی مختلف در جدول ۱ نشان داده شده است.

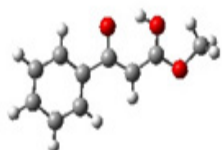
۲-۳. پارامترهای ساختاری

برای پیکربندی انولی کی لیتی MOPP در سطح محاسباتی B3LYP با تابع پایه 6-311++G** محاسبات بهینه سازی هندسه مولکول ها به طور کامل انجام شده است. در جدول ۲ پارامترهای

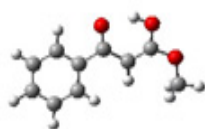
جدول ۱. انرژی های الکترونی بر حسب هارتری برای پیکربندی های MOPP و E_{HB} بر حسب کیلوژول بر مول محاسبه شده در سطوح B3LYP و MP2.

سطح	E_1 (I)	E_1 (II)	E_{HB} (kJ/mol)	$\Delta E=(E_1 - E_2)$
B3LYP/6-311G**	-612/7469144	-612/7219694	65/4796	0
B3LYP/6-311++G**	-612/9454251	-612/9241602	55/8308776	0
MP2/6-311G**	-608/9737782	-608/9501617	62/0039512	0
سطح	E_2 (I)	E_2 (II)	E_{HB}	$\Delta E=(E_2 - E_1)$
B3LYP/6-311G**	-612/7354977	-612/7064398	76/291566448	31/9715453716
B3LYP/6-311++G**	-612/9346505	-612/9100308	64/6390344	28/2887333804
MP2/6-311G**	-608/9587379	-608/9325675	68/7100664	39/487620266
سطح	E_2 (I)	E_2 (II)	E_{HB}	$\Delta E=(E_2 - E_1)$
B3LYP/6-311G**	-612/7354977	-612/7064398	76/291566448	31/9715453716
B3LYP/6-311++G**	-612/9346505	-612/9100308	64/6390344	28/2887333804
MP2/6-311G**	-608/9587379	-608/9325675	68/7100664	39/487620266

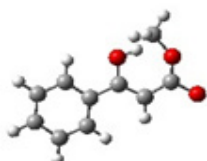
I: پیکربندی سیس II: پیکربندی ترانس
 ΔE : اختلاف انرژی بین پایدارترین پیکربندی سیس (I) با سایر پیکربندی های سیس
 E_{HB} : اختلاف دو شکل سیس و ترانس بر حسب kJ/mol



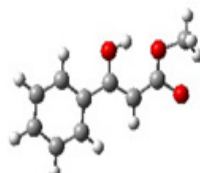
$E_4(I)=55.81$
 $E_4(II)=104.51$



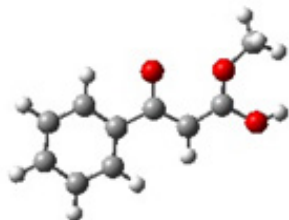
$E_3=US$
 $E_3=US$



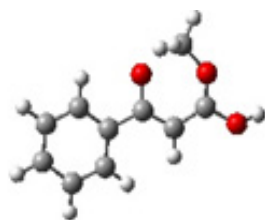
$E_6(I)=99.49$
 $E_6(II)=160.49$



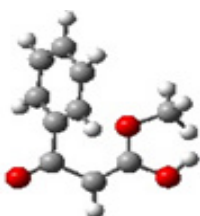
$E_5(I)=US$
 $E_5(II)=US$



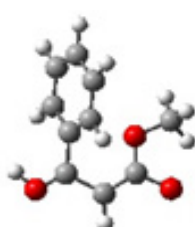
$E_8(I)=US$
 $E_8(II)=US$



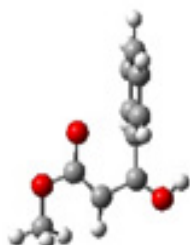
$E_7(I)=184.09$
 $E_7(II)=173.84$



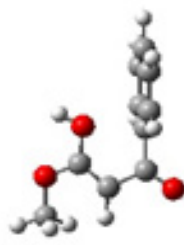
$E_{10}(I)=63.93$
 $E_{10}(II)=62.67$



$E_9(I)=124.64$
 $E_9(II)=116.56$



$E_{12}(I)=US$
 $E_{12}(II)=US$

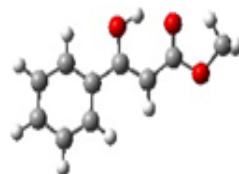
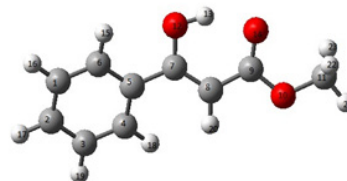


$E_{11}(I)=US$
 $E_{11}(II)=US$

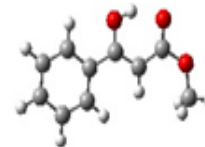
جدول ۲. پارامترهای هندسی و پارامترهای جیلی پیکربندی های سیس انول MOPP و BA محاسبه شده در سطح B3LYP با سری پایه 6-311++G** (2BA,4BA دو کفورمر پایدار سیس- انول BA هستند)

θ (طول پیوند)	MOPP			BA [3]	
	E_1	E_2	E_4	2BA	4BA
$O_{12} \dots O_{14}$	2/590	2/520	2/460	2/513	2/513
$O_{12}-H_{13}$	0/992	1/002	1/029	1/010	1/010
C_7-O_{12}	1/330	1/320	1/300	1/326	1/326
$C_9=O_{14}$	1/230	1/230	1/250	1/250	1/250
C_8-C_9	1/440	1/440	1/430	1/439	1/439
$C_7=C_8$	1/360	1/370	1/380	1/378	1/378
$H_{13} \dots O_{14}$	1/698	1/623	1/511	1/585	1/585
C_7-C_5	1/478	1/478	1/496	1/478	1/478
C_9-O_{10}	1/346	1/350	1/330	1/511	1/511
C_8-H_{20}	1/077	1/076	1/075	1/079	1/079

زاویه (°)	MOPP			BA [3]	
	E_1	E_2	E_4	2BA	4BA
$O_{12}H_{13}O_{14}$	147/570	148/900	151/960	148/9	150/5
$H_{13}-O_{12}-C_7$	107/160	106/360	104/310	105/8	106/1
$C_7=C_8-C_9$	120/330	119/610	118/470	120/6	119/2
$C_8-C_9=O_{14}$	124/730	122/880	120/920	120/5	121/7
$O_{12}-C_7=C_8$	121/760	121/820	122/640	122/2	121/7
$O_{12}-C_7-C_5$	113/929	114/22	118/78	118/6	114/6
$C_5-C_7-C_8$	124/789	123/943	120/993	120/9	124/8
$O_{14}=C_9-O_{10}$	121/789	116/566	111/645	113/8	119/1
$O_{10}-C_9-C_8$	113/473	120/548	125/711	123/9	117/6
$H_{20}C_8C_7$	121/29	119/16	121/31	118/3	120/2
$H_{20}C_8C_9$	118/35	121/19	120/21	121/1	120/6
Φ	-1/05	1/3284	0/0326	8/9	12/6
q_1	0/08	0/07	0/05	0/071	0/061
q_2	0/1	0/09	0/05	0/072	0/076
Q	0/18	0/16	0/1	0/143	0/137
λ	0/21875	0/25	0/34375	0/27656	0/28593
E_{HB}		60.29		67.23	



$E_2(I)=39.45$
 $E_2(II)=108.15$

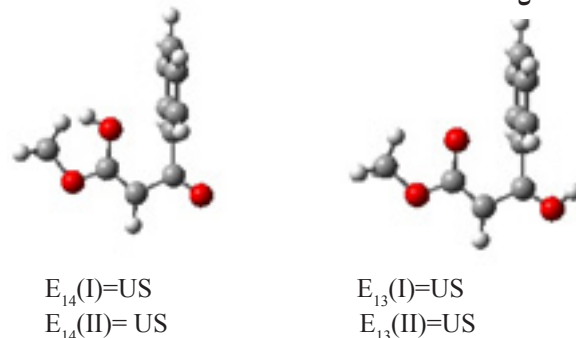


$E_1(I)=0$
 $E_1(II)=61.91$

جدول ۳. فرکانس های ارتعاشی ترکیب MOPP بدست آمده در سطح محاسباتی B3LYP/6-311G**.

ردیف	فرکانس (Freq)	انتساب
1	3274/9	νOH
2	3247/2	νCH
3	3211/5	νCH (Ph) [2]
4	3197/3	νCH (Ph) [20b]
5	3187/2	νCH (Ph) [20a]
6	3176/6	νCH (Ph) [7b]
7	3166/2	νCH (Ph) [13]
8	3156/4	νa CH ₃
9	3123/1	νa CH ₃
10	3050/8	νs CH ₃
11	1679/2	νa C ₇ =C ₈ -C ₉ =O ₁₄ + δ CH
12	1647/7	δ OH + νa C ₇ =C ₈ -C ₉ =O ₁₄
13	1642/3	νCH (Ph) [8a]+ δ CH
14	1614/0	δ OH + ν CH (Ph) [8b]+ δ CH
15	1525/7	ν CH (Ph) [19a]
16	1498/6	δ CH ₃
17	1485/9	δ CH ₃ + ν CH (Ph) [19b]+ δ CH
18	1483/6	δ CH ₃
19	1472/7	δ CH ₃ + ν CH (Ph) [19b]
20	1440/0	δ OH + δ CH + δ CH ₃
21	1399/3	ν C—O + δ OH + δ CH
22	1356/3	ν CH (Ph) [3]
23	1325/1	ν CH (Ph) [14]+δ CH
24	1290/5	δ OH + ν CH (Ph) [19a]
25	1219/2	δ CH + ν C ₉ -O ₁₀ + γ CH ₃
26	1208/8	ν CH (Ph) [9a]+ δ CH
27	1205/2	γ CH ₃ +δ CH + ν CH (Ph) [9a]
28	1184/5	ν CH (Ph) [19b]
29	1170/7	γ CH ₃
30	1109/2	ν CH (Ph) [15]
31	1099/7	δ CH + ν CH (Ph) [15]
32	1053/8	ν CH (Ph) [18a]+ ν O—CH ₃
33	1033/4	ν O—CH ₃ + ν CH (Ph) [18a]+ νc ₈ c ₉
34	1016/0	ν CH (Ph) [12]
35	1002/4	ν CH (Ph) [5]
36	988/4	ν CH (Ph) [17a]
37	966/0	ν O—CH ₃ +δ C ₇ C ₈ C ₉
38	944/4	ν CH (Ph) [17b]
39	875/9	γOH
40	856/3	γ CH (Ph) [10b]
41	846/8	δO ₁₀ -CH ₃ +Δ
42	824/4	γCH+ γ CH (Ph) [11]
43	787/4	γCH+ γ CH (Ph) [11]
44	741/3	γCH+δ C ₉ -O ₁₀ -C ₁₂ + Δ
45	738/0	γCH+ γOH
46	698/4	γCH+ γ CH (Ph) [6a]
47	679/5	δ C ₈ -C ₇ =O ₁₂ + γ CH (Ph) [6a]
48	642/5	δ(Ph) [4]

ادامه شکل ۳.



شکل ۳. شماره گذاری پایدارترین پیکربندی ترکیب MOPP به همراه پیکربندی های سیس-انول (I) و ترانس انول (II) ممکن MOPP، انرژی نسبی آنها بر حسب کیلوژول بر مول محاسبه شده در سطح MP2/6-311G**. (US پیکربندی های ناپایدار را نشان می دهد)

H...O در مولکول فوق نسبت به BA افزایش پیدا کرده است. زاویه پیوند OHO در BA نسبت به MOPP به ۱۸۰ درجه نزدیکتر است، در نتیجه موجب افزایش قدرت پیوند هیدروژنی BA نسبت به MOPP می گردد.

انرژی پیوند هیدروژنی E_{HB} ، دیگر پارامتری که برای مقایسه قدرت پیوند هیدروژنی بین ترکیبات β -دی کریونیل ها به کار می رود، نیز در این جدول آورده شده است. قدرت پیوند هیدروژنی (E_{HB}) است. از بررسی این جدول و مقایسه پارامترهای آن می توان نتیجه گرفت که قدرت پیوند هیدروژنی در BA بیشتر از MOPP است. این نتیجه در توافق خوبی با جابه جایی شیمیایی پروتن در طیف سنجی NMR است. δ_{OH} برای BA ۱۶/۲ ppm و برای BA ۱۳/۶۲ ppm به دست آمده است، هرچه δ_{OH} کمتر باشد قدرت پیوند هیدروژنی کمتر است [۸].

طول O...O نیز پارامتری است که برای مقایسه قدرت پیوند هیدروژنی در ترکیبات β -دی کریونیل به کار می رود. هر چه قدرت پیوند هیدروژنی یک ترکیب بیشتر شود طول O...O کوتاه تر می شود. لذا با توجه به پارامتر اخیر طول O...O ذکر شده در جدول موید قدرت پیوند هیدروژنی بیشتر در BA است.

۳-۳. تجزیه و تحلیل فرکانس های ارتعاشی

فرکانس های ارتعاشی به همراه نسبت دهی طیفی ترکیب MOPP که به روش B3LYP/6-311G* محاسبه شده است در جدول ۳ آورده شده است. طیف ارتعاشی محاسبه شده در تابع پایه مذکور به صورت زیر است.

از صفحه گروه های OH, CH و نیز تغییر شکل داخل و خارج از صفحه و چرخش گروه CH₃ را مشاهده کنیم. در این ناحیه موقعیت حرکت کششی O...O نیز نشان دهنده قدرت پیوند هیدروژنی ترکیبات β-دی کتون می باشد. نوار این حرکت برای MOPP در ۹/۴۰۳ cm⁻¹ ظاهر می شود و برای BA این نوار در ۴۱۰ cm⁻¹ قرار دارد [۷]. موقعیت این نوارها به خوبی تایید کننده این مساله است که قدرت پیوند هیدروژنی BA بیشتر از MOPP است.

۴. نتیجه گیری

انرژی الکترونی کنفورمر های انول مولکول MOPP نشان می دهد برای مولکول MOPP سه کنفورمر پایدار سیس- انول که قادر به برقراری پیوند هیدروژنی هستند وجود دارد. با مقایسه پارامترهای ساختاری و پارامترهای جیلی کنفورمرهای سیس- انول مولکول MOPP با BA و مقایسه E_{HB} مشاهده می شود قدرت پیوند هیدروژنی در مولکول BA بیشتر از MOPP است. این نتیجه در توافق خوبی با جابه جایی شیمیایی پروتون در طیف سنجی NMR و فرکانس ارتعاشی گروه OH و فرکانس کششی O...O که در سطح محاسباتی B3LYP/6-311G** محاسبه شده است، می باشد.

۵. مراجع

- [1] R. Boese, M.Y. Antipin, D. Blaser and K.A. Lyssenko, *J. phys. chem B.*, 102 (1998) 8654.
- [2] K. Mayer and D. Ber, *Chem. Ges.*, 44 (1918) 2718.
- [3] G. Buemi and F. Zuccarello, *J. Theor. chem.*, 2 (1997) 302.
- [4] R.L. Lintvedt and H.F. Holtzclaw, *Am. Chem. Sco.*, 882 (1966) 713.
- [5] S.F. Tayyari, H. Reissi and Z. Ahmadabadi, *Spectrochem. Acta A.*, 58 (2002) 2669.
- [6] S.F. Tayyari, Th. Zeegers-Huysekens and J.L. Wood, *Spectrochim A.*, 35 (1979) 1265.
- [7] S.F. Tayyari and Th. Zeegers-Huysekens, J.L. Wood, *Spectrochim A.*, 35 (1979) 1289.
- [8] S.F. Tayyari, J.S. Emampour, M. Vakili, A.R. Nekoei, H. Eshghi, S. Salemi, M.J. Hassanpour Emsley, S.C. Nyburg and A.W. Parkins, *J. Mol., Struct*, 794 (2006) 204.
- [9] K.W. Kohlrausch and F.A. Pongratz, *Proceedings Mathematical Sciences.*, 2 (1934) 615.
- [10] S.F. Tayyari, S. Salemi, M. Zahedi Tabrizi and M. Behforouz, *J. Mol., Struct*. 694 (2004) 91.

۱۵امه جدول ۳.

ردیف	فرکانس (Freq)	انتساب
49	632/2	δ(Ph) [6b]
50	493/9	Δ δ C ₅ —C ₇ =C ₈
51	448/2	γ (Ph) [16b] +Δ
52	411/1	γ (Ph) [16a]
53	403/9	Δ+ υo...o
54	359/3	Δ+ υo...o
55	290/0	γ (Ph) [15]
56	245/6	γ (Ph) [16b] +Δ
57	218/3	Δ
58	180/2	τ CH ₃
59	132/8	τ CH ₃
60	114/4	τ CH ₃
61	103/8	γ C—C—Ph
62	70/9	τ
63	27/6	τ

اعداد داخل کروشه از منبع [۹] بدست آمده است.

اختصارات به کار رفته در جدول عبارتند از:

υ: کشش پیوند؛ τ: تغییر شکل خارج حلقه کیلیتی؛ υ_s: کشش متقارن پیوند؛ τ: پیچش

υ_a: کشش نامتقارن پیوند؛ δ: خمش در صفحه؛ γ: خمش خارج صفحه؛ Δ: تغییر شکل درون حلقه کیلیتی

۳-۱-۳. بررسی ناحیه ارتعاشی ۳۵۰۰-۱۷۰۰ cm⁻¹

در این ناحیه ν_aCH₃، ν_sCH₃، ν_aCH₃، νOH دیده می شود. که از بین حرکات فوق تنها موقعیت نوار کششی OH تعیین کننده قدرت پیوند هیدروژنی ترکیب می باشد. در MOPP نوار مربوط به کشش νOH در ناحیه ۳۲۷۴/۹ cm⁻¹ می توان دید. این نوار در BA در ناحیه ۲۶۵۰ cm⁻¹ دیده می شود، هرچه قدرت پیوند هیدروژنی بیشتر باشد این نوار در فرکانس پایین تری مشاهده می شود.

۳-۲-۳. بررسی ناحیه ارتعاشی ۱۷۰۰-۱۰۰۰ cm⁻¹

در این ناحیه علاوه بر فرکانس های کششی C=C، C—O، C=O، فرکانس خمشی داخل صفحه گروه های CH₃، CH، α، OH دیده می شوند. برای ترکیب MOPP در ناحیه ۱۶۷۹/۲ cm⁻¹ نوار مربوط به خمش داخل صفحه δ_{CH} کشش نامتقارن کوپل شده C=O، C=C مشاهده شده است. همچنین در ناحیه فرکانسی ۱۶۴۷/۷ cm⁻¹ نوار مربوط به δ_{OH} به همراه ν_aC₇=C₈—C₉=O₁₄ مشاهده می شود [۱۰].

۳-۳-۳. بررسی ناحیه ارتعاشی زیر ۱۰۰۰ cm⁻¹

در این ناحیه انتظار می رود شیوه های مربوط به خمش خارج