

## رتبه دوم پژوهش‌های بنیادی



**عنوان طرح:** اثبات آنتی آروماتیسیت با اثر آنیزوتروپی در طیف  $^1\text{H NMR}$   
**پژوهشگر:** دکتر اریک کلینپتر  
**کشور:** آلمان  
**رشته:** شیمی  
**مؤسسه علمی:** دانشگاه پترزدام آلمان

### چکیده طرح:

خواص مغناطیسی فضایی آنیون آنتی آروماتیک ۹-اگزاآتراسن ۱۲- و دی آنیون ۹-دیمریک ۲-۱۱ آن، با روش محاسباتی اختلال اوربیتال‌های اتمی نامتغیر Gauge، روش (GIAO) و بکارگیری مفهوم جابجایی شیمیایی مستقل از هسته (NICS) محاسبه شده است. مقادیر بدست آمده برای خواص مغناطیسی (through-space NMR shielding) TSNMRS که می‌تواند برای تعیین آنتی آروماتیسیت ناشی از جریانات خلاف مدار حلقه بکار رود، برای ترکیبات آنیونی ۲-۱۱ و ۱۲- و دیگر مولکول‌های آنتی آروماتیک خنثی و یونی (مربوط به مطالعات قبلی) مورد مطالعه قرار گرفت. به صورت کمی ثابت شده است که اثرات آنیزوتروپی گروه‌های عاملی در طیف  $^1\text{HNMR}$  خاصیت پاسخی مولکولی جابجایی شیمیایی مستقل از هسته فضایی نظری است.

### زندگی نامه:

- ۱۹۶۵-۷۰ تحصیل در دانشگاه لیپزیگ در رشته شیمی، تز دیپلم: "شناسایی طیفی NMR آزایندولیزین‌ها"،
  - ۱۹۷۴-۷۴ دستیار در همان دپارتمان شیمی، تز مقطع dr.rer.nat: "بررسی سطح الکترونی رنگ‌ها و حدواسط‌های رنگ بوسیله NMR و محاسبات شیمی کوانتمی"،
  - ۱۹۷۴-۸۲ دستیار ارشد در همان دپارتمان شیمی،
  - ۱۹۸۱ تخصص: "تعیین کانفیگوراسیون، کانفورماسیون و اتعطاق‌پذیری درون مولکولی ترکیبات آلی بوسیله NMR و محاسبات شیمی کوانتمی"،
  - ۱۹۸۲-۸۵ دانشیار شیمی آلی در دانشگاه آدیساآبا، اتیوپی،
  - ۱۹۸۵-۹۲ تدریس طیف سنجی (از سال ۱۹۸۸) دانشگاه مارتین-لوتر هاله-ویتنبرگ، از ۱۹۸۹ تا ۱۹۹۲ رئیس دپارتمان شیمی تجزیه،
  - از ۱۹۹۳ استاد شیمی تجزیه و رئیس دانشکده شیمی دانشگاه پترزدام آلمان،
  - ۲۰۱۱ دکترای افتخاری از دانشگاه Szeged (SZTE) مجارستان،
- تالیفات بیش از چهارصد مقاله، کتاب و مقالات مروری و هشتاد سخنرانی در کنفرانس‌های بین‌المللی.

