ملخص

في هذه الدراسة، تم تطبيق ثلاث طرق لـ DFT لدراسة الأشكال التوتوميرية الممكنة من الهستامين، بوريماميد، ميتياميد والسيميتيدين التي تم الحصول عليها من خلال تنقل بروتون داخل الجزيء في الفراغ وفي المذيبات .وقد أجري تأثير المذيبات باستخدام نهجين :الضمني (PCM)والصريح (في وسط مونوهيدراتي).

تظهر الحسابات التي تم الحصول عليها أن الطريقتينB3LYP و M062X أعطتا نتائج مقبولة، ولكن ωB97X- D كانت غير مناسبة لهذا النوع من الدراسة، واستخدام القاعدة 6-31G (d) كان لصالح توازن أفضل بين بنيتي التوتوميرين.

Abstract

In this study, three methods of DFT have been applied to study the possible tautomeric forms of histamine, burimamide, metiamide and cimetidine obtained by the intramolecular proton transfer in vacuum and in the solvent. The effect of solvent was carried out using two approaches: implicit (PCM) and explicit (middle monohydrate).

Calculations obtained show that the B3LYP and M062X methods gave acceptable results; however the ωB97X-D has been found unsuitable for this type of study. The combination of the base 6-31G (d) was in favor of a better balance between the two tautomers.

Résumé

Dans cette étude, les trois méthodes de la DFT ont été appliquées pour étudier les formes tautomériques possibles de l'histamine, burimamide, métiamide et cimétidine obtenus par le transfert de proton intramoléculaire sous vide et dans le solvant. L'effet de solvant à été réalisé en utilisant deux approches : implicite (la PCM) et explicite (milieu monohydraté).

Les calculs obtenus ont montrés que les méthodes B3LYP et M062X ont donné des résultats acceptables, en revanche la ωB97X-D a été trouvée inadaptée pour ce type d'étude, l'association de la base 6-31G (d) à été en faveur d'un meilleur équilibre entre les deux tautomères.