

: الدوران الداخلي لمجموعة الميثيل حول محور التماثل للمجموعة C3 في الجوامد يعاقب بحاجز جهد . مقدار وشكل دالة الجهد يعكس البيئة الجزيئية والإلكترونية المحيطة بالمجموعة في الشبكية . عند درجات الحرارة المنخفضة توصف ديناميكية المجموعة كميًا عن طريق احتمالية الإختراق لحاجز الجهد، بينما عند درجات الحرارة العالية توصف الحركة كلاسيكيًا بالدوران أو القفز فوق حاجز الجهد. الحساب النظري لحاجز الجهد الميعيق للحركة الدورانية الداخلية لمجموعة الميثيل في بلورة Acetylacetone بواسطة طريقة تفاعل الذرة- الذرة هو هدف الرسالة. مقدار حاجز الجهد وشكله ومنشأة تم عرضه.