**چكيده**

در این کار، تشکیل پیوند هیدروژنی درون مولکولی ترکیب فسفروس ایلید پایدار حاصل از واکنش دی متیل استیلن دی کربوکسیلات با تری فنیل فسفین در حضور ترکیباتی از حلقه تترازول با شیوه‎های نظری بررسی شده است. پیشتر محصول عمده با ساختار ایزومری Z با داده‎های تجربی NMR نیز تایید گردیده است. نوع و میزان استحکام پیوند هیدروژنی درون مولکولی با شیوه های محاسباتی متنوع مانند اوربیتال اتمی مستقل از سنج (GIAO NMR)، AIM،NBO و بار و اسکن 360 درجه مطالعه شده است. استحکام پیوند هیدروژنی درون مولکولی در محدوده متوسط تا قوی طبقه بندی می شود و تشکیل ساختار عمده ایزومری Z را تایید می‎نماید.

**كلمات كليدي:** ایزومری، فسفروس ایلید، شیوه های محاسباتی، پیوند هیدروژنی درون مولکولی