

عنوان مقاله:

مروری کوتاه بر تاثیر محاسبات DFT در سنتز فیش-تروپیش و کاتالیست های کبالت برای سنتز

محل انتشار:

دومین کنفرانس بین المللی در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1400)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

مصطفی ترکاشوند - دانشجوی تحصیلات تکمیلی، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

مهکامه رنجبر - دانشجوی تحصیلات تکمیلی، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

خلاصه مقاله:

استفاده از محاسبات تئوری تابعی چگالی DFT یک روش جدید، کاربردی و بسیار کارآمد برای بررسی و فهم واکنش های شیمیایی است. در این مقاله مروری سعی شده تا با بررسی چند نمونه از تحقیقات آزمایشگاهی و تئوری پیرامون موضوع سنتز فیش-تروپیش و یکی از مهم ترین کاتالیست های این سنتز یعنی کاتالیست کبالت (Co)، اهمیت استفاده از روش های محاسباتی در شیمی بیان شود. سه نوع از انواع کاتالیست کبالت که توسط پژوهشگران حوزه شیمی محاسباتی بررسی گردیده بود در این مطالعه مورد بحث واقع شده است. با این مرور کوتاه تا حدودی روشن شد که سطوح کبالت از کاتالیست های بسیار مناسب برای سنتز ارزشمند فیش-تروپیش هستند.

کلمات کلیدی:

تئوری تابعی چگالی (DFT)، سنتز فیش-تروپیش، کاتالیست کبالت، هیدروژناسیون.

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1265787>

