

عنوان مقاله:

بررسی ترمودینامیکی حدواسط حاصل از باز شدن سیکلوپروپن بوسیله ی $Au(I)$ از دیدگاه تئوری

محل انتشار:

سومین همایش ملی شیمی، تحقیقات، فناوری ها و دستاوردها (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 3

نویسندگان:

سحر قنواتی - دانشگاه آزاد واحد تهران مرکز، گروه شیمی، تهران، ایران

علیرضا آریافرد - دانشگاه آزاد واحد تهران مرکز، گروه شیمی، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

محاسبات DFT جهت بررسی ترمودینامیکی حد واسط ها ی حاصل از باز شدن حلقه سیکلو پروپن دارای استخلاف در موقعیتهای C_1 و C_2 به وسیله کاتالیزور $Au(I)$ مورد بررسی قرار گرفت. داده های محاسباتی ما نشان میدهند که، پایداری حدواسطه ای آلیل کاتیونی به وسیله قدرت دهنده گی استخلافهای متصل به موقعیتهای C_1 و C_2 کنترل میشود.

کلمات کلیدی:

بررسی ترمودینامیکی، سیکلوپروپن، کاتالیزور طلا، داده های محاسباتی.

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1521279>

