سیویلیکا – ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:

بررسی مکانیسم افزایش اکسایش آلیل هالیدها به کمپلکس ۰)Pd) از دیدگاه تئوری

محل انتشار:

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

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

نازنین کوه گیلویی – دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکز، گروه شیمی، تهران، ایران

علیرضا آریافرد – دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکز، گروه شیمی، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

محاسبات DFTجهت بررسی مکانیسم واکنش افزایش اکسایش آلیل هالیدها به وسیله کمپلکس ۰)Pd)مورد بررسی قرار گرفت. ما دریافتیم که واکنش افزایش اکسایش از طریق مکانیسم های مختلفی که شامل کوئوردیناسیون،SN۲ ، SN۲/ و یونی اتفاق می افتد. داده های محاسباتی ما نشان می دهند که برای ترک کننده مانند (Cl)، مرحله کوئوردینه شدن Pd به آلیل کلراید سرعت واکنش را کنترل می کند.

کلمات کلیدی:

افزایش اکسایش، آلیل هالیدها، پالادیم، داده های محاسباتی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1521406