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

عنوان مقاله:
بررسی اثر ممان تک‌قطبی به پیرولیز اتیل فرمات و آنالوگ های‌های اتم‌های S , Se با استفاده از روش محاسبات مکانیک کوانتومی آغازین و تحلیل NBO

محل انتشار:
سومین همایش ملی کاربردهای شیمی در فناوریهای نوین (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:
فاطمه مصطفایی - *دانشکده شیمی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد اراک*

غزال حسین پور - *دانشکده شیمی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد اراک*

خلاصه مقاله:
در این تحقیق عوامل مؤثر بر تفکیک حرارتی اتیل فرمات و اتیل متان دی تیوات و اتیل متان دی سلنوات مورد بررسی قرار گرفته‌اند. نتایج حاصل از محاسبات مکانیک کوانتومی آغازین در سطح نظری B3LYP/6-311+G نشان می‌دهد که انرژی فعال سازی تفکیک حرارتی از ترکیب شماره یک به ترتیب شماره سه کاهش می‌یابد. همچنین نتایج حاصله تحلیل NBO نشان می‌دهد که انرژی پایدار حاصل از انتقال الکترونیکی (کرد و در متن اصلی مقاله) از ترکیب یک به سه افزایش می‌یابد. اینک سهولت شکستن برخی از پیوندهای شرکت کننده در حالت گذارد و پایین آمدن انرژی فعال سازی از ترکیب یک به ترکیب صدا توجیه می‌کند. همچنین مقدار ممان دوقطبی برای ترکیب شماره یک 2/2463 و برای ترکیب شماره دار 2/5997 و برای ترکیب شماره سه 2/462 می‌باشد. در نتیجه روند تغییرات اختلاف ممان دوقطبی با روند تغییرات (فرمول در متن اصلی مقاله) هم راستا می‌باشد.

کلمات کلیدی:
ممان دوقطبی، انیل فرمات همان تحلیل NBO انرژی فعال سازی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/233342