

عنوان مقاله:

بررسی محاسباتی مکانیسم جایگیری کربونیل در کمپلکس $Mn(CO)_5CH_2F$ به روش تئوری تابعی چگالی

محل انتشار:

اولین کنفرانس ملی نفت، گاز پتروشیمی و توسعه پایدار (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

زهرا پاکدل - دانشجوی کارشناسی ارشد شیمی معدنی دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام (ره)، تهران، ایران

محمد یوسفی - عضو هیئت علمی گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام (ره)، تهران، ایران

رویا احمدی - عضو هیئت علمی گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام (ره)، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

در این تحقیق محاسبات کوانتومی به روش تئوری تابعی چگالی DFT بر روی جایگیری کربونیل CO در کمپلکسها $Mn(CO)_5CHF$ انجام شد برای این منظور ابتدا همه ساختارهای موردنظر بهینه سازی هندسی شده و سپس مکانیسم جایگیری CO در حالت های مختلف مورد ارزیابی قرار گرفت. مسیر انجام واکنش جایگیری از طریق مکانیسم مهاجرت گروه آلکیل بوده است. کمپلکس اولیه چهار مسیر مختلف برای رسیدن به محصول خواهد داشت. نتایج محاسبات نشان می دهد که یک مسیر ارجح تر از سایر مسیرها بوده که این به اثرات فضایی و الکترونی نسبت داده می شود

کلمات کلیدی:

تئوری تابعی چگالی، $Mn(CO)_5CH_2F$ ، واکنش جایگیری

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/462694>

