

## عنوان مقاله:

بررسی تئوری پارامترهای ترمودینامیکی واکنش سنتز مشتقات آریلیدین روهدانین ها با استفاده از روش DFT

## محل انتشار:

چهارمین کنفرانس ملی تحقیقات نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 3

## نویسندگان:

زهره باوی وسمی - گروه شیمی، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز، ایران

اسداله فرهادی - دانشگاه صنعت نفت، دانشکده نفت اهواز، گروه علوم پایه، بخش شیمی

## خلاصه مقاله:

در چند دهه ی گذشته با توجه به فعالیت بیولوژیکی گسترده ی مشتقات روهدانین این ترکیبات بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. بنابراین در این کار ما از تئوری تابعیت چگالی (DFT) و روش B3LYP با سری پایه ی 31G-6 استفاده کردیم و مطالعه ای بر روی پارامترهای ترمودینامیکی از قبیل  $\Delta H^{\circ f}$  و  $\Delta G^{\circ f}$  واکنش سنتزی یک سری از ترکیبات آریلیدین روهدانین ها بحث کردیم. که نتایج نشان داد که واکنش سنتز آریلیدین روهدانین ها گرماگیر و غیرخودبخودی می باشد.

## کلمات کلیدی:

آریلیدین روهدانین ها، تئوری تابعیت چگالی (B3LYP, 6-31G)، DFT، پارامترهای ترمودینامیکی

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/467317>

