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

عنوان مقاله:

بررسی پایداری ارتعاشی و ترمودینامیک شیمیایی ترکیبات نوین M=Li(+), Be(+2), Al(+3), O(-1), F(_), He, Ne)M@C(20)OH با روش DFT

محل انتشار:

دومین کنفرانس بین المللی یافته های نوین پژوهشی در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 21

نویسنده:

سیدداود حسینی - *شهرستان بروجرد*

خلاصه مقاله:

ویژگی های ساختاری و پایداری ارتعاشی ترکیب های درون قفسی M@C20 ، که M شامل: Li, Be(+2), Al(+3), O(-2), F(-),(+) He و Ne است با استفاده از نظریه ی تابعی چگالی (DFT) مورد مطالعه قرارگرفت. ابتدا همه ی ساختارها با تابعی هیبریدی B3LYP و سری پایه 6-311_G(d.p) بهینه سازی شدند، سپس محاسبه های مربوط به فرکانس های ارتعاشی در همان سطح تئوری بر روی آنها انجام شد. پس از انجام محاسبه ها و بررسی خروجی ها مشخص شد که در میان نمونه های اندوهدرال بدون هر گروه عاملی ساختار(3+) [Al@C20] دارای بیشترین مقدار قطبیت و انتقال باربود. به جز ساختار He@C20 همه ی واکنش های درون قفس شدن عناصر یاد شده بر اساس تغییرات تابع ترمودینامیکی انرژی آزادگیبس خود به خودی بودند، مطلوب ترین واکنش درون قفس شدن از نظر تابع های ترموشیمیایی محاسبه شده را ساختار(3+)[Al@C(20)] داشت. و کمترین مقدار را نیز ملکول He@C(20) نشان داد.

کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی، فولرین های درون قفسی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/477371