

عنوان مقاله:

AN INVESTIGATION INTO THE THEORITICAL PHYSICAL-CHEMISTRY PROPERTIES OF RGANOMETALLIC COMPLEXSES (M=Li, Na and K)BY DFT

محل انتشار:

هجدهمین همایش شیمی فیزیک ایران (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 3

نویسنده:

G Mahmoudzadeh

خلاصه مقاله:

This paper presents a comparative study carried out on the physical-chemistry propertiesbased within the Density Functional Theory (DFT) in the metal complexes (Li, Na, and K).To this end, this study set out to evaluate energy values of the Highest Occupied MolecularOrbital (EHOMO), the Lowest Unoccupied Molecular Orbital (ELUMO), the gap (ΔE), IonizationPotential (IP), Electron Affinity (EA), golobal Hardness (η), electronegativity (χ), ChemicalPotential (μ), global softness (σ), electrophilicity

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/552523>

