

عنوان مقاله:

بررسی سینتیکی سنتز 1-و-4 دی هیدروپیریدین های متقارن و نامتقارن در فاز گازی با استفاده از روش DFT

محل انتشار:

پنجمین همایش ملی تحقیقات نوین در شیمی، مهندسی شیمی و نفت (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

سیده مهسا موسویان - گروه شیمی، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز، ایران

اسداله فرهادی - Petroleum University of Technology, Faculty of Science, Ahvaz ۶۱۹۸۱-۴۴۴۷۱, Iran

خلاصه مقاله:

مطالعات سینتیکی سنتز برخی از 1-و-4 دی هیدروپیریدین های متقارن و نامتقارن با استفاده از تیوری تابعیت چگالی با مجموعه پایه B3LYP/6-31G مورد مطالعه قرار گرفت. انرژی آزاد گیبس و ثابت سینتیکی واکنش از ترکیبات خروجی محاسبه شد. داده های بدست آمده نشان داد طبیعت و نوع ترکیبات بر روی میزان سنتز آنها موثر باشد

کلمات کلیدی:

1-و-4 دی هیدروپیریدین های متقارن و نامتقارن، تیوری تابعیت چگالی، ثابت سینتیکی واکنش، انرژی آزاد گیبس،

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/696550>

