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

عنوان مقاله:
برهمکنش های اصلی در کمپلکس BHC های هالوژندار با AuCl با روش های محاسباتی GGA-D

محل انتشار:
پنجمین کنفرانس بین المللی نوآوری های اخیر در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1396)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسنده:
بابک گلزاده - *گروه شیمی، دانشگاه پیام نور، تهران ، ایران*

خلاصه مقاله:
گونه های دوظرفیتی هتروسیکلی بوردار (Boron Heterocyclic Divalents; BHEs) که از جایگزینی دو اتم نیتروژن موجود در گونه های دوظرفیتی هتروسیکلی نیتروژن دار آردوینگو (Arduengo N-Heterocyclic Divalents; NHEs) با اتمهای بور (که کمبود الکترون دارند) به صورت نظری پیشنهاد شده اند در برخی از موارد، فاصله انرژی یک تایی- سه تایی (Singlet-Triplet Energy Gap; ΔEST) بیشتری نسبت به همتاهای NHE خود دارند. بهعلاوه، ساختار هندسی BHE های سه تایی، مسطح با زاویهی دووجهی (D1) تقریبا صفر به دست آمده است. در مقابل BHE های یکتایی مرتبط با آنها، ساختاری خمیده(واپیچیده) دارند که اصلی ترین دلیل آن، برهمکنش های متقاطع فوق مزدوج شدن π و σ در حلقه می باشند. بر اساس روش آنالیز تجزیه انرژی (Energy Decomposition Analysis; EDA) محاسبه مقدار دهندگی σ در پیوند M←L و پیوند برگشتی M→L برای کمپلکس های مورد مطالعه در این پروژه انجام شده است. در محاسبه مقدار دهندگی σ در پیوند بین قطعه های برهمکنش کننده، به چهار عبارت تقسیم می شود که به صورت عبارت زیر، به بهترین وجه، نمایش داده می شود: ΔEint= ΔEelstat + ΔEPauli + ΔEorb+ΔEdisp

کلمات کلیدی:
کاربن هتروسیکلی، بور، برهمکنش های متقاطع، طلا EDA، ETS-NOCV

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/739766