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

عنوان مقاله:
بررسی ساختار الکترونی و خواص ترمودینامیکی لیگاندهای بازشیف نوع سالن به کمک روشهای محاسباتی

محل انتشار:
همایش ملی مهندسی شیمی (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:
حسن مولائی - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهر ری، دانشکده تحصیلات تکمیلی*

حمیدرضا صانعی فر - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهر ری، دانشکده تحصیلات تکمیلی*

خلاصه مقاله:
به عنوان یک لیگاند چهاردندانه در شیمی کنوردیناسیون Salen= (Salen= 2,2/- Ethylenbis (nitrilomethylidine) diphenol N,N/ (Ethylenbis(Salicylimine کاربرد بسیار وسیعی دارد. به کمک محاسبات مکانیک کوانتومی ساختار بهینه این ترکیب و مشتقات آن که در نتیجه استخلاف گروه های عاملی --PH-CH2F-OH CF3-CH3 در موقعیتهای متفاوت حلقه آروماتیک این ترکیب به دست آمدند با روش B3LYP و سری پایه 6-311g در فاز گازی به دست آمد. Z-matrix این ترکیب برمبنای ساختار مسطح مربعی تعریف گردید و ساختار بهینه با استفاده از نرم افزار گوسین 98 محاسبه شد . محاسبات پارامترهای مربوط به طول پیوند و زوایای پیوند نشان میدهد ساختار پایدار برای کلیه این لیگاندها در حالت آزاد به صورت ترانس وا پیچیده با تقارن موضعی C2 می باشد. به کمک محاسبات Freq ، انرژی آزاد گیبس و انرژی پایداری سیستم ها محاسبه شد. نتایج حاصل از محاسبات نشان میدهد توانایی لیگاند سالن با استخلاف CF3 در هر چهار موقعیت روی حلقه آروماتیک در تشکیل کمپلکس بیشتر از سایر استخلاف های مورد بررسی است.

کلمات کلیدی:
شیمی محاسباتی، بازشیف ، سالن، گوسین Z-matrix,98

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/80192