

عنوان مقاله:

قطبش پذیری و توصیف گره‌های ایزوتیوسیانات پلی این ها و تیوسیانات پلی این ها با استفاده از محاسبات نظری از اساس و نظریه تابعیت چگالی

محل انتشار:

پنجمین کنفرانس بین المللی پژوهش کاربردی در شیمی و مهندسی شیمی با تاکید بر فناوری های بومی ایران (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

فاطمه غلامیان - گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه یزد، یزد، ایران

منصور نمازیان - دانشیار گروه شیمی فیزیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران

محمدرضا نوربالا - دانشیار گروه شیمی فیزیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران

خلاصه مقاله:

فضای میان ستاره ای یک آزمایشگاه خاص است که میزبانی برای ایجاد مولکول های ارگانیک کشف شده در فضا می باشد. ایزوتیوسیانات پلی این ها و تیوسیانات پلی این ها دو دسته از این ترکیبات بین ستاره ای را تشکیل می دهند. در این مطالعه به بررسی قطبش پذیری و مطالعه توصیفگرهای کلی فعالیت Global Reactivity Descriptors این ترکیبات می پردازیم. اثر طول زنجیر بر روی قطبش پذیری، الکترونگاتیوی، الکترون دوستی، سختی کل، طول موج جذبی و شکاف انرژی ایزوتیوسیانات و تیوسیانات پلی این ها، با استفاده از روش های از اساس و نظریه تابعیت چگالی مطالعه می گردد.

کلمات کلیدی:

ایزوتیوسیانات پلی این ها، تیوسیانات پلی این ها، محاسبات از اساس، نظریه تابعیت چگالی، توصیف گره های کلی فعالیت، فضای بین ستاره ای

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/837008>

