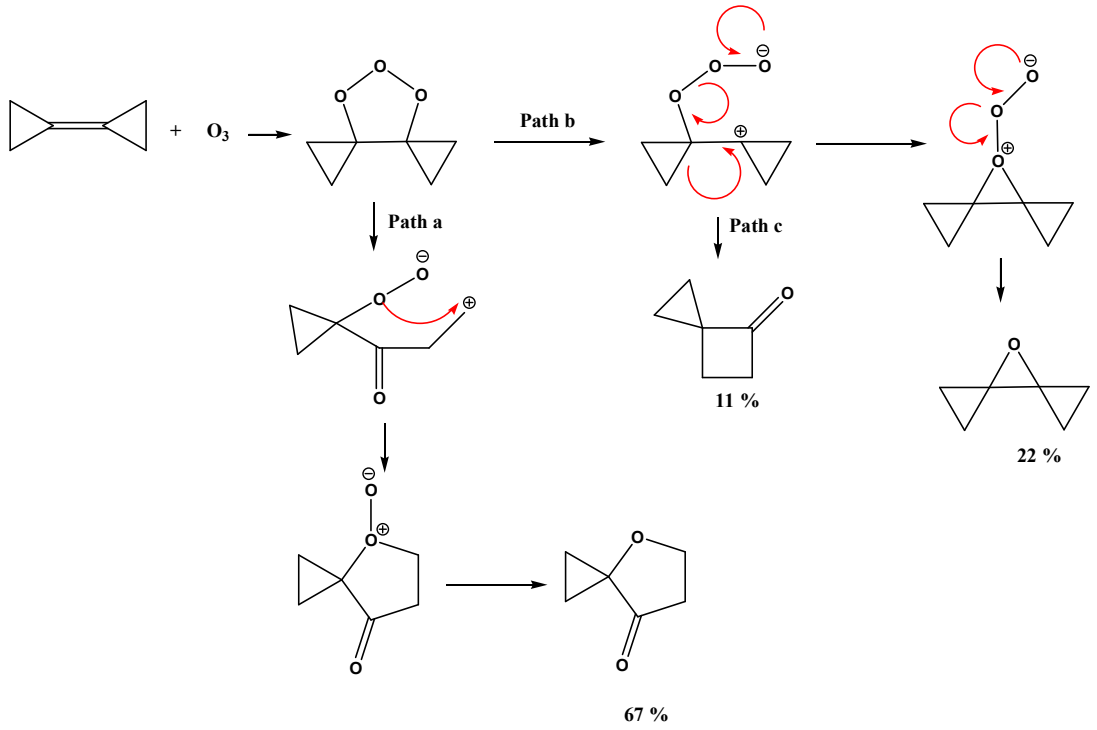
چکیده :

در این پایان نامه مکانیسم واکنش اوزون با آلکیلیدن سیکلوپروپان ها برای تولید ترکیبات کربونیلی و با استفاده از روش های شیمی کوانتومی DFT–B3LYP ، CAS(6,6) و UHF بررسی شد. محاسبات مربوط به محصولات واکنش، حالت های گذار و حدواسط ها برای تخمین انرژی فعالسازی استفاده شد. انرژی پتانسیل این فرایندها به ترتیب شامل ۴،۵،۳ و یک حالت گذار برای مسیرهای A-DFT، A-CAS(6,6)، B-CAS(6,6) و C-UHF می باشد. بر اساس نتایج و سدهای انرژی محاسبه شده و درصد محصولات نهایی می توان نتیجه گرفت که مسیر A به مسیر B و مسیر B نیز به مسیر C ارجحیت دارد.



کلیدواژه ها: اوزونولیز، آلکیلیدن سیکلوپروپان، DFT، CAS، UHF