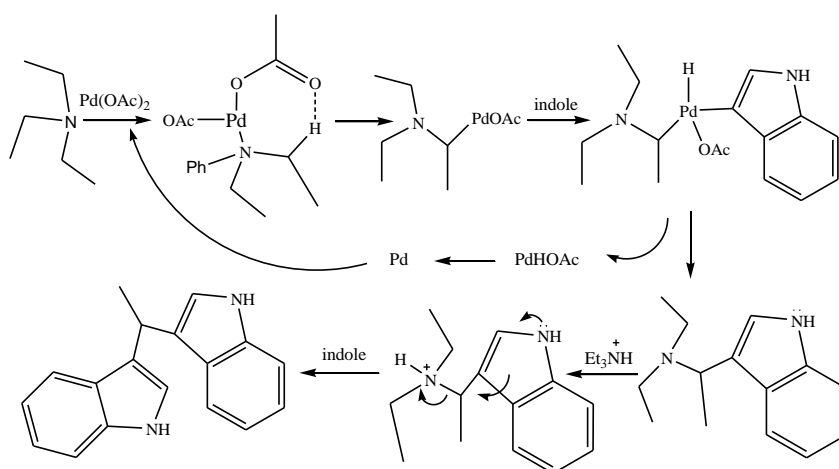


عنوان به فارسی:

بررسی شیمی کوانتومی مکانیسم آلکیل دار شدن کاتالیز شده مشتقات ایندول در حضور پالادیم

چکیده به فارسی:

در این پایان نامه، محاسبات مربوط به تشکیل بیس ایندولیل متان در حضور کاتالیزور استات پالادیوم با استفاده از تابع محاسباتی RB3LYP/6-31g(d)، مورد بررسی قرار گرفت.



طی این مطالعه، تری اتیل آمین به عنوان یک منبع کربنی و پالادیم به عنوان ترکیبی فعال کننده در گسستن پیوند C_{SP3}-H به کار رفته است. عوامل الکترونی منجر به جابه جایی در موقعیت ۳ حلقه ایندولی می شود. کوئوردینه شدن تری اتیل آمین به پالادیم حدواسطی را پدید می آورد که از طریق فعال سازی پیوند کربن و هیدروژن واکنش را پیش می برد. در نهایت محصولی به نام ۱-بیس ایندولیل متان پدید می آید که حاصل جانشینی روی حلقه در موقعیت ۳ است. طی این واکنش از طریق رسم شکل دقیق برای مینیمم ها و حالات گذار و تعیین و تایید ساختار و انرژی نقاط روی PES و به دست آوردن انرژی های فعال سازی در مسیر واکنش مورد نظر به دنبال تعیین مسیر و نواحی عملکرد تری اتیل آمین به عنوان منبع کربن و منحنی مربوط به نقاط آغازی و پایانی و حالات گذار آن بوده ایم.

کلید واژه: ایندول- پالادیوم استات- آلکیلاسیون- آمین سه ظرفیتی- تری اتیل آمین - پیوند C-H آلیفاتیک-

روش B3LYP