

# مطالعه نظریه تابع چگال واکنش اوزون با آکلیدن سیکلوپروپان

سیده خاطره شکوهی راد\*, دکتر حسین طاهرپور نهمی,

1395-6-24

در این پایان نامه مکانیسم واکنش اوزون با آکلیدن سیکلوپروپان ها برای تولید ترکیبات کربونیلی و با استفاده از روش های شیمی کوانتومی B3LYP-DFT، 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 3,4,5 و یک حالت گذار برای مسیرهای DFT-A، A درصد و شده محاسبه انرژی سدهای و نتایج اساس بر. باشد می C-UHF و B-CAS(6,6)، CAS(6,6) محصولات نهایی می توان نتیجه گرفت که مسیر A به مسیر B و مسیر B نیز به مسیر C ارجحیت دارد.

کلمات کلیدی : اوزونولیز، آکلیدن سیکلوپروپان، DFT، CAS، UHF

[Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database](#)

[دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها](#)