

# بررسی شیمی کوانتومی مکانیسم آلکیلدار شدن کاتالیز شده مشتقات ایندول توسط پالادیم

زهرا راستروان\*، حسین طاهرپور نهزمی،

97-10-09

در این پایان نامه، محاسبات مربوط به تشکیل بیس ایندولیل متان در حضور کاتالیزور استات پالادیوم با استفاده از تابع محاسباتی (d)6-31g, RB3LYP، مورد بررسی قرار گرفت. طی این مطالعه، تری اتیل آمین به عنوان یک منبع کربنی و پالادیم به عنوان ترکیبی فعالکننده در گسستن پیوند H-CSP3 بهکار رفته است. عوامل الکترونی منجر به جابهجایی در موقعیت 3 حلقه ایندولی میشود. کوئوردینه شدن تری اتیل آمین به پالادیم حدواسطی را پدید میآورد که از طریق فعالسازی پیوند کربن و هیدروژن واکنش را پیش میبرد. در نهایت محصولی به نام 1 و 1- بیس ایندولیل متان پدید میآید که حاصل جانشینی روی حلقه در موقعیت 3 است. طی این واکنش از طریق رسم شکل دقیق برای مینیممها و حالات گذار و تعیین و تایید ساختار و انرژی نقاط روی PES و بهدست آوردن انرژیهای فعالسازی 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 بودهایم. کلید واژه: ایندول- پالادیوم استات- آلکیلاسیون- آمین سه ظرفیتی- تری اتیل آمین - پیوند H-C آلیفاتیک-روش B3LYP

کلمات کلیدی: ایندول- پالادیوم استات- آلکیلاسیون- آمین سه ظرفیتی- تری اتیل آمین - پیوند H-C آلیفاتیک-روش B3LYP

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

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