

عنوان مقاله:

سنتز و شناسایی پلیمر کوبوردیناسیونی جدید برپایه کبالت و مطالعه ساختاری آن توسط نظریه DFT

محل انتشار:

دومین سمینار شیمی کاربردی ایران (سال: 1396)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

نقیسه مدانلو جویباری - پژوهشکده پتروشیمی، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، تهران

سارا طریقی - پژوهشکده پتروشیمی، پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران، تهران

خلاصه مقاله:

در این تحقیق چار چوب فلز-آلی تک بعدی از کبالت با فرمول شیمیایی (فرمول در متن اصلی مقاله) سنتز شده و با استفاده از آنالیز تک بلور اشعه ایکس مورد شناسایی قرار گرفت در اینجا bpy معادل 2 و 2- بی پیریدین و bpdc معادل 2 و 2- بی پیریدین دی کربوکسیلات می باشد. با اینکه در مواد اولیه از ماده 1 و 10- فنانترویلین- 5 و 6- دی-اون استفاده شده بود اما در محصول 2 و 2- بی پیریدین دی کربوکسیلات تشکیل شده است. با استفاده از محاسبات تیوری تابع چگالی ساختار الکترونی ترکیب مورد نظر بهینه شد. همچنین، طیف مادون قرمز به دست آمده از چارچوب کبالت سنتز شده با استفاده از محاسبات فرکانس، کاملاً در تطابق با داده های تجربی بوده است. ساختار الکترونی حالت پایه ترکیب با روش TDDFT/PCM در حلال آب به منظور تعیین انرژی و ساختار اوربیتالهای مولکولی محاسبه شد. الگوی به دست آمده مرکز کبالت (II) را با ساختار هشت وجهی انحراف یافته نشان داد.

کلمات کلیدی:

پلیمر کوبوردیناسیونی، ساختار بلوری، محاسبات DFT، اوربیتال مولکولی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/762394>

