

عنوان مقاله:

مکانیسم واکنش چند جزئی بین سیکلو هگزیل ایزوسیانیید (ترشیو بوتیل ایزوسیانیید) و دی متیل استیلن دی کربوکسیلات در حضور 2-مرکاپتو بنزوکسازول: یک مطالعه نظری

محل انتشار:

پنجمین کنفرانس ملی پژوهش های نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

بتول مکی آبادی - دانشگاه صنعتی سیرجان، سیرجان، ایران

محمد زکریانزاد - دانشگاه پیام نور، تهران

خلاصه مقاله:

در این تحقیق، مکانیسم واکنش بین سیکلو هگزیل ایزوسیانیید، دی متیل استیلن دی کربوکسیلات در حضور 2-مرکاپتو بنزوکسازول با استفاده از روش B3LYP و مجموعه پایه 6-311+g(d,p) مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به نتایج تئوری، یک مکانیسم منطقی برای واکنش پیشنهاد شد و مرحله اول واکنش به عنوان مرحله تعیین کننده سرعت شناخته شد. از دیدگاه نظری مطلوب ترین مسیر و ساختار برای محصول پیش بینی شد. به منظور ارزیابی میزان پایداری هر یک از ساختارهای سهیم در واکنش و نیز بررسی اثر ساختار و ثابت دی الکتریک حلال، تمام ساختارها در فاز گازی و در حلال دی کلرومتان بهینه شده اند.

کلمات کلیدی:

مکانیسم واکنش، آلکیل ایزوسیانییدها، اثر حلال، ثابت دی الکتریک، مرحله تعیین کننده سرعت

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/909930>

