

مروری بر محاسبات انتقال شیمیایی کربوکسی الکیل دار شده با pd

مؤلف: دکتر محمد (فرشید) اکبر

www.ketab.ir

سرشناسه
عنوان و نام پدیدآور : اکبر، محمد (فرشید)، ۱۳۶۷-
مروری بر محاسبات انتقال شیمیایی
کربوکسی الکیل دار شده با pd /
مؤلف محمد (فرشید) اکبر.
تهران: ره آورد مهر، ۱۴۰۰.
مشخصات نشر :
مشخصات ظاهری : ۷۸ ص: مصور: ۲۱/۵×۱۴/۵ س.م.
شابک : ۱۳۰۰۰۰ ریال : ۱-۳۱-۸۳۵۵-۶۰۰-۹۷۸
وضعیت فهرست نویسی : فیا
یادداشت : کتابنامه.
موضوع : شیمی -- داده پردازي
Chemistry -- Data processing
شیمی -- واکنش ها
Chemical reactions
کاتالیزورهای پالادیم
Palladium catalysts
رده بندی کنگره : QD۳۹۳
رده بندی دیویی : ۵۴۲/۸۵۴
شماره کتابشناسی ملی : ۸۷۷۴۲۶۳
اطلاعات رکورد کتابشناسی : فیا

نام کتاب: مروری بر محاسبات انتقال
شیمیایی کربوکسی الکیل دار شده با pd



نویسنده: دکتر محمد (فرشید) اکبر
شابک: ۱-۳۱-۸۳۵۵-۶۰۰-۹۷۸
ناشر: ره آورد مهر
تیراژ: ۱۵۰۰ نسخه
چاپ و صحافی: ایران کهن
نوبت چاپ: اول / سال چاپ: ۱۴۰۰
تهران، خیابان شهید مدنی، تقاطع بزرگراه امام علی (ع)، کوچه درویش
پلاک ۴، طبقه ۴ کدپستی: ۱۶۱۶۷۴۵۳۶۵ تلفن: ۷۷۵۸۹۶۳۷
همراه: ۰۹۳۵۲۷۵۸۲۶۴
قیمت: ۱۳۰۰۰۰ تومان
www.rahavardmehr.com
Rahavardmehr.1390@yahoo.com
Rahavardmehrpublish1390@gmail.com
اینستاگرام: @Rahavardmehrpublish
کانال تلگرام: @Rahavardmehr

فهرست

۹

پیشگفتار

فصل اول

مروری بر شیمی محاسباتی

- ۱-۱- کلیات ۱۲
- ۱-۱-۱- روش‌های نیمه تجربی ۱۳
- ۱-۱-۲- روش‌های آغازین ۱۳
- ۱-۳- نظریه‌ی تابع چگالی (DFT) ۱۴
- ۲-۱- سری‌های پایه ۱۴
- ۱-۲-۱- سری‌های پایه حداقل ۱۵
- ۲-۲-۱- سری‌های پایه با شکافتگی ظرفیت ۱۵
- ۳-۲-۱- تابع‌های پایه قطبیده شده ۱۵
- ۴-۲-۱- سری‌های پایه برای اتم‌های دوره سوم به بعد ۱۶
- ۳-۱- چند روش محاسبه ۱۶
- ۱-۳-۱- محاسبه‌های بهینه‌سازی ساختار ۱۷
- ۲-۳-۱- محاسبه‌های فرکانس ۱۷
- ۳-۳-۱- محاسبه‌های تک نقطه‌ای ۱۷
- ۴-۱- شرح محاسباتی ۱۸

مروری بر واکنش‌های افزایش اکسایشی و حذف کاهشی

- ۲۲-۱-۲- واکنش افزایش اکسایش ۲۲
- ۲۵-۲-۲- برخی از مکانیسم‌های واکنش افزایش اکسایش ۲۵
- ۲۵-۲-۲-۱- افزایش سه مرکزی ۲۵
- ۲۵-۲-۲-۱-۱- افزایش H_2 ۲۵
- ۲۸-۲-۲-۱-۲- افزایش O_2 ۲۸
- ۲۹-۲-۲-۱-۳- افزایش $C-H$ ۲۹
- ۳۰-۲-۲-۱-۴- افزایش سایر گونه‌های متقارن $Y-Y$ ۳۰
- ۳۱-۲-۲-۲- افزایش اکسایشی هسته دوست‌های RX ۳۱
- ۳۳-۲-۲-۳- مکانیسم رادیکالی ۳۳
- ۳۴-۲-۳-۳- واکنش حذف کاهشی ۳۴
- ۳۶-۲-۳-۱- کاربرد واکنش‌های حذف کاهشی ۳۶
- ۳۷-۲-۳-۲- حذف کاهشی در کمپلکس‌های هشت وجهی [۱۸] ۳۷
- ۳۸-۲-۳-۳- حذف کاهشی در کمپلکس‌های مسطح مربع ۳۸
- ۴۰-۲-۳-۴- حذف کاهشی در سیستم‌های دو هسته ای [۱۵] ۴۰
- ۴۱-۲-۳-۴- پژوهش‌های انجام شده بر روی واکنش افزایش اکسایش کمپلکس پالادیم (II) ۴۱
- ۴۲-۲-۳-۴- برخی از مطالعات انجام شده بر روی واکنش افزایش اکسایش کمپلکس پالادیم (II) ۴۱
- ۴۱-۲-۳-۴-۱- انواع سوپسترا در افزایش اکسایش به کمپلکس پالادیم (II) ۴۱
- ۴۳-۲-۳-۴-۱-۶ [۱۶] ۴۳
- ۴۳-۲-۳-۴-۲- سوپستراهای گروه A ۴۳
- ۴۴-۲-۳-۴-۱-۲- واکنش گروه A با کمپلکس‌های پالادیم (II) ۴۴
- ۴۴-۲-۳-۴-۳- واکنش گروه B با کمپلکس‌های پالادیم (II) ۴۴
- ۴۴-۲-۳-۴-۱-۳- مکانیسم افزایش اکسایش تک الکترونی ۴۴
- ۴۵-۲-۳-۴-۲- مکانیسم افزایش اکسایش دو الکترونی ۴۵

۴-۴-۲- واکنش افزایش اکسایش سوبستراهای قطبی کلاس C به کمپلکس پالادیم (II) [۳۱].....	۴۶
۵-۲- گروه ۱۷.....	۴۷
۱-۵-۲- هالوژن- هیدروژن [۳۲].....	۴۷
۲-۵-۲- هالوژن - کربن غیر آروماتیک.....	۴۸
۳-۵-۲- هالوژن کربن آروماتیک.....	۴۸
۴-۵-۲- هالوژن- هالوژن.....	۴۹
۶-۲- گروه ۱۶.....	۴۹
۱-۶-۲- اکسیژن- هیدروژن.....	۴۹
۲-۶-۲- اکسیژن - کربن.....	۴۹
۷-۲- گروه ۱۴.....	۵۰
۱-۷-۲- گروه ۱۴- هیدروژن.....	۵۰
۲-۷-۲- قلع - گوگرد.....	۵۰
۸-۲- ترکیبات فلزی.....	۵۱
۹-۲- بررسی تجربی واکنش افزایش اکسایش هالو متیل قلع به کمپلکس های پالادیم (II).....	۵۱

فصل سوم

بحث و نتیجه گیری

۱-۳- مطالعه محاسباتی مکانیسم کربوکسی آلکین دار شدن کاتالیز شده با Pd (II) با استفاده از اکسیدکننده ید (III).....	۵۶
۲-۳- واکنش کلی.....	۶۰
۳-۳- مکانیسم جدید برای واکنش اکسی آلکینیل دار شدن.....	۶۴
۴-۳- مسیر جایگزین کمپلکس ید (III) پالادیم (II) و نیل:.....	۸۶
۵-۳- واکنش کربوکسی پالادیم دار کردن:.....	۰۷
۶-۳- نتیجه گیری:.....	۷۲

منابع:.....	۷۴
-------------	----

پیشگفتار

اعتقاد بر این است که انتقال شیمیایی کاتالیز شده با Pd (II) با استفاده از اکسیدکننده Pd (IV) از طریق چرخه کاتالیتیکی $\text{Pd (IV)}/\text{Pd (II)}$ صورت می گیرد.

در مطالعه کامپیوتری حاضر نشان داده ایم که این عبارت همیشه درست نیست و در بعضی موارد خاص یک مکانیسم جایگزین می تواند صورت بگیرد. در این تحقیق مکانیسم واکنش کربوکسی آلکین دار شدن کاتالیز شده با Pd (II) ، یک اولفین با به کار بردن آلکینیل بنزید و اکسولن با هدف محاسبات تئوری تابع چگالی شرح داده شده است. واکنش کاتالیتیکی با مکانیسمی که در آن یک کمپلکس و نیلیدین مانند Pd (II) و نه کمپلکس Pd (IV) نقش پیش برنده را بازی می کند، به پیش می رود. درک مکانیسم واکنش کربوکسی آلکین دار شدن می تواند نتایج مهمی در فرآیندهای مختلف کاتالیز شده با کمپلکس های فلزات واسطه در حضور آلکین بنزید و اکسولن ها داشته باشد. اخیراً کمپلکس های پالادیم (IV) به عنوان حد واسطه های مسوول مرحله تشکیل پیوند C-X در تعدادی از واکنش های کاتالیتیکی در نظر گرفته شده اند.