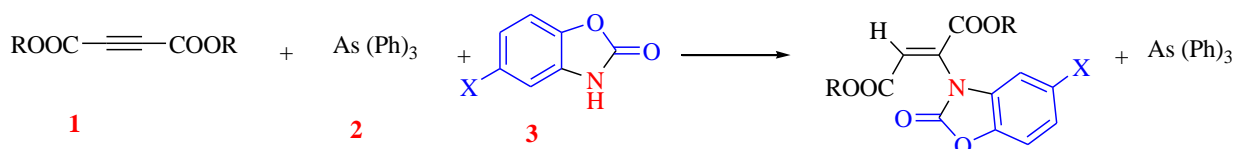


چکیده

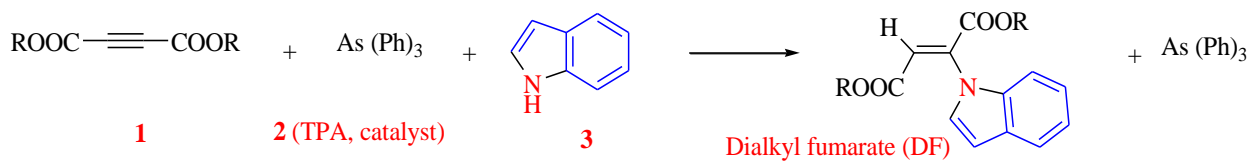
در این کار تحقیقاتی سینتیک و مکانیسم واکنش های شیمیایی چند جری با کمک روشهای تجربی و نظری مطالعه شده است. در بخش تجربی از تکنیک طیف سنجی فرابنفش-مرئی و در قسمت محاسبات کوانتومی از نرم افزار گوسین استفاده شده است. در کار تحقیقاتی اول و دوم (شکل 1-1)، از طیف سنجی فرابنفش-مرئی سینتیک و مکانیسم واکنش میان دی آلکیل استیلن دی کربوکسیلات، تری فنیل آرسین و دو مشتق از بنزواکسازولینون 2- بنزواکسازولینون و 5- کلرو- 2- بنزواکسازولینون بررسی شد. در کار تحقیقاتی سوم، از طیف سنجی مرئی فرابنفش و سطح نظری B3LYP/6-31+G(2d,p) و نیز از سطح m06-2x/6-31+G(2d,p) سینتیک و مکانیسم واکنش میان دی آلکیل استیلن دی کربوکسیلات، تری فنیل آرسین و ایندول (شکل 2-1) بحث و بررسی شد. در تمامی واکنش های مطالعه شده، محصول واکنش یک آلکن می باشد. داده های تجربی حاصل از اثرات حلال، دما، ساختار و غلظت واکنش دهنده ها بر روی مکانیسم پیشنهادی بررسی گردید. ترکیب نتایج تجربی و نظری گویای این بود که مرحله چهارم، مرحله تعیین کننده سرعت است. همچنین برای کار تحقیقاتی اول، دوم و سوم پارامتر های E_a و k ، پارامتر های فعال سازی (ΔS^\ddagger , ΔH^\ddagger , ΔG^\ddagger) و در قسمت نظری کار تحقیقاتی سوم پارامتر های ترمودینامیکی (ΔS^0 , ΔH^0 , ΔG^0) برای کلیه مراحل مکانیسم پیشنهادی در فاز گازی، به دست آمده است. محصول واکنش با ترکیبات هتروسیکل نیتروژن دار (2- بنزواکسازولینون، 5- کلرو- 2- بنزواکسازولینون و ایندول) یک ترکیب N- وینیل هتروسیکل است. مکانیسم پیشنهاد شده چهار مرحله دارد که با داده های تجربی مورد تایید قرار گرفت. بررسی و مطالعه نظری این مکانیسم بیانگر این بود که مراحل چهارم و پنجم به صورت همزمان اتفاق می افتند و مرحله چهارم از مکانیسم، مرحله تعیین کننده سرعت واکنش می باشد. مرحله چهارم واکنش بصورت نظری در فاز گازی و مایع بررسی شده است.



R = Me, Et and t-but

X = H or Cl

شکل 1-1. واکنش میان دی آلکیل استیلن دی کربوکسیلات (1)، تری فنیل آرسین (2) و N-H اسید (2- بنزواکسازولینون و 5- کلرو- 2- بنزواکسازولینون) (3) برای تشکیل محصول 2- (2- اکسو بنزو [d] اکسازول-3(2H)- ایل) فومارات.



R = Me and Et

شکل 1-2. واکنش میان دی آلکیل استیلن دی کربوکسیلات (**1**)، تری فنیل آرسین (**2**) و N-H اسید (ایندول) (**3**) برای تشکیل محصول دی آلکیل 2- (3H-ایندول - 2- ایل) فومارات.

کلمات کلیدی: سینتیک، مکانیسم، طیف بینی فرابنفش- مرئی، تری فنیل آرسین، مرحله تعیین کننده سرعت، نمودار ایزوسینتیک، واکنش های چند جزئی