عنوان طرح: بررسي مسيرهاي تخريب برخي از تركيبات مواد منفجره CHNOFتك حلقوي تا سه حلقوي بر اساس روشهاي آغازين و نيمه تجربي

امجری طرح:دکتر افتاده

مدت اجرا : ۸ ماه

چكيده:

امروزه، با استفاده از محاسبات كوانتومي مطالعه بسياري از خواص مولكولي و واكنش‌ها امكان‌پذير شده است. در اين تحقيق مسيرهاي تخريب تركيبات منفجره از نوع CHNOFمشتمل بر تركيبات تك حلقوي تا سه حلقوي نيترو آمين مورد مطالعه قرار گرفته است زيرا بررسي سينتيكي و ترموديناميكي يك فرايند به كمك روش هاي آغازين و نيمه تجربي متداول در شيمي كوانتومي ميسر است. براي شروع تخريب تركيبات مورد نظر اين تحقيق چندين مسير در نظر گرفته شد و سد انرژي براي انجام شدن هر كدام از اين مسيرها با استفاده از روش‌هاي RHF و UHF به كمك مجموعه پايه هاي 6-31G** و همچنين روش نيمه تجربي AM1 به دست آمد. نتايج بدست آمده نشان مي‌دهد كه بهترين مسير از نظر سينتيكي براي تمامي اين تركيبات باز شدن پيوند $N\text{-}NO_2$ مي‌باشد.

براي مطالعه ترموديناميكي اين مسيرها، ساختار هر كدام از مواد اوليه و محصولات به طور جداگانه با روش AM1 بهينه شدند. سپس مقادير ΔH ، ΔS و ΔG براي مسيرهاي مختلف محاسبه شدند كه اين نتايج نشان مي‌دهد كه از نظر ترموديناميكي و سينتيكي، بهترين مسير براي شروع تخريب در تمامي اين نوع تركيبات مسير گسسته شدن پيوند $N\text{-}NO_2$ مي‌باشد.