ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์	การประยุกต์ทฤษฎีรีแอกชันคลาสแทรนสิชันสเตตในการศึกษาจลนพลศาสตร์สำหรับปฏิกิริยาการดึงไฮโดรเจนของแอลเคนด้วยอะตอมคลอรีน
ผู้เขียน	นายธรรมรัฐ เพียรสวรรค์
ปริญญา	วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (เคมี)
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์	ดร. นาวี กังวาลย์

บทคัดย่อ

จลนพลศาสตร์ของการดึงไฮโดรเจนสำหรับกลุ่มปฏิกิริยา แอลเคน + คลอรีน $\longrightarrow$ ไฮโดรเจนคลอไรด์ + แอลคิล ของอีเธน โพรเพน และทุกไอโซเมอร์ของบิวเทนและเพนเทน ถูกศึกษาทางทฤษฎี การดึงไฮโดรเจนขั้นปฐมภูมิขั้น ทุติยภูมิ และตติยภูมิถูกศึกษาที่ทุกตำแหน่ง จำนวนปฏิกิริยาที่ทำการศึกษามีจำนวนทั้งสิ้น 29 ปฏิกิริยา วิธี Density functional theory (DFT) ที่ถูกใช้ในการศึกษาครั้งนี้คือ Becke-style “Half and Half” functional with the Lee, Yang, and Parr correlation functional (BHandHLYP) ชุดพื้นฐานที่ใช้ในการคำนวณคือ double-zeta split valence basis set (cc-pVDZ) จากการศึกษาพบว่ามีความสัมพันธ์เชิงเส้นระหว่างพลังงานก่อกัมมันต์และพลังงานของปฏิกิริยา วิธีทฤษฎีรีแอคชันคลาสทรานสิชันสเตทร่วมกับความสัมพันธ์เชิงเส้นของพลังงาน (RC-TST/LER) และทฤษฎีทรานสิชันสเตท (TST) ถูกใช้เพื่อทำนายค่าคงที่การเกิดปฏิกิริยา จากการวิเคราะห์ผลพบว่าการใช้วิธีทฤษฎีรีแอคชันคลาสทรานสิชันสเตทร่วมกับความสัมพันธ์เชิงเส้นของพลังงานในการทำนายค่าคงที่การเกิดปฏิกิริยาให้ข้อผิดพลาดน้อยกว่า 100 เท่า เปรียบเทียบกับทฤษฎีทรานสิชันสเตท

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

Thesis Title Application of the Reaction-Class Transition State Theory on Kinetic Study for the Hydrogen Abstraction Reactions of Alkane with Chlorine Atom

Author Mr. Tammarat Piansawan

Degree Master of Science (Chemistry)

Thesis Advisor Dr. Nawee Kungwan

ABSTRACT

Kinetics of the hydrogen abstraction reactions for alkane + Cl → alkyl + HCl Reaction Class was studied theoretically including ethane, propane and all isomers of butane and pentane. Primary, secondary and tertiary hydrogen abstractions were studied at all positions. The number of studied reactions is twenty nine reactions. Density functional theory (DFT) method used in this study is the Becke-style "Half and Half" functional with the Lee, Yang, and Parr correlation functional (BHandHLYP). Basis set utilized to calculation is double-zeta split valence basis set (cc-pVDZ). It was found that there are linear energy relationships of activation energy and reaction energy of all reactions. Reaction class transition state theory incorporating with linear energy relationship (RC-TST/LER) method and explicit transition state theory (TST) were used to predict thermal rate constants of any reaction in the hydrogen abstraction class. Our analyses indicated that less than 100 times systematic errors on the average exist in the predicted rate constants using the RC-TST/LER method while comparing to explicit rate calculations.

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved