ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์ การคำนวณค่านิวเคลียร์ชีลดิงของคาร์บอนและไนโตรเจนอะตอม
ชื่อผู้เขียน นาย สัมฤทธิ์ อัศดรวิเศษ
วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์
คณะกรรมการตรวจสอบวิทยานิพนธ์ :
รศ.ดร.บัณฑิต ณ สาพูน ประธานกรรมการ
ผศ.ดร.จิตติ โอฬารรัตน์มณี กรรมการ
อ.ดร.สังวาล ดวงไทย กรรมการ

บทคัดย่อ

ในการศึกษาค่านิวเคลียร์ชีลดิงของคาร์บอนอะตอมและไนโตรเจนอะตอม โดยใช้โปรแกรม CNDO/S นั้น ซึ่งสามารถศึกษาหาค่าของเคมิคัลชิพ เมื่อเปรียบเทียบค่าเคมิคัลชิพของคาร์บอนอะตอมที่ได้จากการคำนวณกับค่าที่ได้จากการทดลองในกลุ่มอนุกรมโมเลกุลไฮโดรคาร์บอนจะได้ผลลัพธ์ค่าสัมประสิทธิ์ของสหสัมพันธ์เป็น 0.9311 ถือได้ว่าแบบจำลอง CNDO/S ให้ผลเป็นที่น่าพอใจ สำหรับค่าเคมิคัลชิพของไนโตรเจนอะตอมในกลุ่มอนุกรมโมเลกุล NX_3 ซึ่งกำหนดให้ X เป็นหมู่แทนที่อัลคิล มีค่าสัมประสิทธิ์ของสหสัมพันธ์เป็น 0.8220 ในกลุ่มอนุกรม X_3CNO_2 ได้ค่าสัมประสิทธิ์ของสหสัมพันธ์เท่ากับ -0.8665 กล่าวได้ว่าแบบจำลอง CNDO/S ยังมีความเหมาะสมไม่เพียงพอกับกลุ่มอนุกรมโมเลกุลซึ่งมีออกซิเจนเป็นองค์ประกอบ

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

Thesis Title Nuclear Shielding Calculations of Carbon and Nitrogen Atoms

Author Mr.Somrid Assadonwisad

M.S. Physics

Examining Committee :

Assoc.Prof.Dr.Bundit Na Lamphun Chairman

Assist.Prof.Dr.Chitti Oralratmanee Member

Lecturer Dr.Sangwahn Duangthai Member

Abstract

Studying Nuclear Shielding of Carbon and Nitrogen atoms by using CNDO/S programme can be evaluated in terms of Chemical Shifts. The calculated values of the atoms were compared with those of the experiments. For Carbon atoms of the hydrocarbon series , the correlation coefficient is 0.9311 shows that the results from CNDO/S model is satisfying. For Nitrogen atoms of NX_3 series , when X is the substituent of Alkyl groups , the correlation coefficients is 0.8220. For those of X_3CNO_2 series, the correlation coefficient is -0.8665. Indicating that the CNDO/S model is not adequate for the molecules compose with Oxygen atoms.

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved