

عنوان مقاله:

بررسی تاثیر استخلاف ها بر خواص فوتوفیزیکی و انتقال پروتون درون مولکولی در مشتقات ۱-هیدروکسی -H₁-ایمیدازول

محل انتشار:

ششمین همایش ملی توسعه علوم فناوریهای نوین در گیاهان دارویی، شیمی و زیست شناسی ایران (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

حسین روحی - استاد گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

زهرا لاجوردی - دانشجوی ارشد شیمی-فیزیک، دانشگاه گیلان

خلاصه مقاله:

در این تحقیق، اثر استخلاف های مختلف (NO₂, F, CN, NH₂) در بخش گیرنده پروتون ۱- هیدروکسی -H₁-ایمیدازول بر خواص فوتوفیزیکی (قدرت نواسنگر، پیک های جذبی و نشری) آن ها با استفاده از روش DFT و DFT-TD در سطح نظری (PBE⁰-۶-۳۱++G(d,p) بررسی شده است. سطوح انرژی پتانسیل (PESs) در حالت های پایه (S₀) و برانگیخته (S₁) ارزیابی شدند. همچنین خواص ساختاری، الکترونیکی و ممان دو قطبی محاسبه شدند. نتایج نشان میدهد که ارتفاع سد انرژی پتانسیل فرآیند انتقال پروتون درون مولکولی در حالت پایه (S₀) بیشتر از حالت برانگیخته (S₁) است، در نتیجه سرعت فرآیند انتقال پروتون در حالت برانگیخته مطلوب تر می باشد. با مقایسه طول موجها، حداکثر مقدار جابه جایی استوکس برای استخلاف های گیرنده الکترون (HL-NO₂) و (HL-CN) مشاهده شد. نتایج محاسبه شده ما در این کار همچون جابه جایی طول موج ها با مشاهدات تجربی مطابقت خوبی دارد

کلمات کلیدی:

هیدروکسی -H₁-ایمیدازول، جابه جایی استوکس، سد انرژی پتانسیل، روش DFT-TD، انتقال پروتون درونمولکولی در حالت برانگیخته

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1870529>

