سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
بررسی نظری اثر کوپلاژوایبرونیک در پایداری سیستم های مولکولی (GeX2 (X=F, Cl and Br

محل انتشار:
چهارمین کنفرانس ملی شیمی کاربردی (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:
گلرخ محمودزاده - *اراک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد اراک، دانشکده شیمی*

غزاله کوچک زاده - *خرم آباد، دانشگاه آزاد اسلامی، دانشکده شیمی*

خلاصه مقاله:
مطالعه حاضر به منشا وایبرونیکی ناپایداری در مولکول های خطی تقارن بالای آنالوگ های (GeX2 (X= F, Cl ,Br اشاره دارد. بهینه سازی و محاسبه فرکانس های (حقیقی -مجازی) ساختارها با استفاده از روش تابعی هیبریدیB3LYP انجام گردید .از تعداد فرکانس های مجازی برای تعیین ماهیت نقاط ایستا استفاده شد. در بررسی عوامل موثر بر خواص انرژیتیکی و پیکربندی الکترونی ترکیبات در تقارن بالاو تقارن پایین روش هایDFT و TD-DFT مورد استفاده قرار گرفت. مطالعات نشان داده انحراف ساختاری مولکول های تقارن بالا ناشی از اثر یان؛تلر بوده که منشا شکست تقارن در این سیستم ها می باشند . مختصه نرمالی که مسئول خمش و تبدیل ساختار مسطح D ∞ h به ساختار C2v است، u Q بوده و خمیدگی ساختار در اثر کوپلاژ وایبرونیک اتفاق می افتد بعبارتی، ناپایداری ساختار تقارن بالا درعبارت (فرمول درمتن مقاله)اثر متقابل حالت پایه با حالت برانگیخته را در راستای مختصه نرمال نشان می دهدکه اثر شبه؛ تلر در پیکربندی های خطی نامیده می شود.. نتایج به دست آمده نشان می دهد؛ ساختارهای خمیده با تقارن C2v پایدارتر از ساختارهای خطی با تقارن D∞h هستند.

کلمات کلیدی:
کوپلاژ وایبرونیک، شکست تقارن، اثر یان؛تلر، مختصه نرمال

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/957053