

## عنوان مقاله:

مطالعه خواص اپتیکی 4-برمو؛ 3-کلروفنول و 3-کلرو 4-؛ یدوفنول با استفاده از نظریه تابع چگالی

## محل انتشار:

چهارمین کنفرانس ملی شیمی کاربردی (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

## نویسندگان:

رضا گلستانی - ایران سبزوار شهرک توحید دانشگاه حکیم سبزواری دانشکده علوم گروه شیمی

بهنام مهدوی - ایران سبزوار شهرک توحید دانشگاه حکیم سبزواری دانشکده علوم گروه شیمی

علی اصغر رهنمای علی آباد - ایران سبزوار شهرک توحید دانشگاه حکیم سبزواری دانشکده علوم گروه فیزیک

## خلاصه مقاله:

در این مقاله خواص اپتیکی دو ترکیب 4-برمو؛ 3-کلروفنول  $C_6H_4ClBrO$  و 3-کلرو 4- یدوفنول  $C_6H_4ClIO$  از جمله سهم حقیقی و موهومی تابع دیالکتریک، ضریب شکست، ضریب خاموشی، تابع اتلاف انرژی و ضریب بازتاب مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافتهی خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب GGA و با استفاده از نرمافزار Wien2k صورت گرفته است

## کلمات کلیدی:

4-برمو؛ 3-کلروفنول و 4-کلرو 3-؛ یدوفنول، خواص نوری، خواص الکترونی، تابع چگالی.

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/957102>

