مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۲، شمارهٔ ۳، پاییز ۱۴۰۱
DOI: 10.47176/ijpr.22.3.61502

تنظیم خواص اپتوالکترونیکی کمپلکس کلرید هم‌پایه فلزی دی فنیل- بی‌پیریدین

حیدر م. هادی، قصی ح. الغالبی

دانشکده فیزیک، کالج آموزش، دانشگاه القادسیه، عراق

پست الکترونیکی: hayder.mohammed@qu.edu.iq

(دریافت مقاله: ۱۴۰۱/۰۴/۰۷ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۴۰۱/۰۴/۱۴)

چکیده

مطالعهٔ کمپلکس‌های فلزی مولکول‌های آلی توجه زیادی را برای کشف سازوکارهای انتقال بار از طریق تک‌مولکول‌های آلی فلزی به خود جلب کرده است. در این کار، ما خواص اپتوالکترونیکی کمپلکس کلرید فلز واسطه هم‌پایهٔ دی فنیل –بی پیریدین را بررسی می‌کنیم. با تغییر فلز واسطه در گروه اتم‌های Co، Cu، Fe، Mg، Ru و Zn، امکان‌پذیر بودن دستکاری خواص نوری و الکترونیکی سامانه را اثبات می‌کنیم. از محاسبات نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) با تابعی B3LYP برای تعیین خواص الکترونیکی این مولکول‌های فلزی از جمله پتانسیل یونش، الکترون‌خواهی، گاف انرژی، الکترونگاتیوی، سختی، نرمی و ممان دوقطبی استفاده می‌شود. برای درک عملکرد نوری سامانه‌ها، طیف جذب آنها را در نواحی فرابنفش و فروسرخ، در چارچوب DFT وابسته به زمان بررسی می‌کنیم. نشان می‌دهیم که شش اتم فلزی مورد بررسی، توانایی تنظیم خواص نوری الکترونیکی کمپلکس‌های مولکولی را دارند.

واژه‌های کلیدی: کمپلکس‌های مولکولی آلی، کمپلکس کلرید فلزی، خواص الکترونی، طیف جذب، محاسبات نظریه تابعی چگالی

مقالهٔ کامل در بخش انگلیسی همین شمارهٔ مجله به چاپ رسیده است.