



مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۲، شماره ۳، پاییز ۱۴۰۱

DOI: 10.47176/ijpr.22.3.61502

تنظیم خواص اپتوالکترونیکی کمپلکس کلرید هم پایه فلزی دی فنیل - بی پیریدین

حیدر م. هادی، قصی ح. الغالی

دانشکده فیزیک، کالج آموزش، دانشگاه القادسیه، عراق

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

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

چکیده

مطالعه کمپلکس های فلزی مولکول های آلی توجه زیادی را برای کشف سازوکارهای انتقال بار از طریق تک مولکول های آلی فلزی به خود جلب کرده است. در این کار، ما خواص اپتوالکترونیکی کمپلکس کلرید فلز واسطه هم پایه دی فنیل - بی پیریدین را بررسی می کنیم. با تغییر فلز واسطه در گروه اتم های Zn و Ru ، Mg ، Fe ، Cu ، Co امکان پذیر بودن دستکاری خواص نوری و الکترونیکی سامانه را اثبات می کنیم. از محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) با تابعی B3LYP برای تعیین خواص الکترونیکی این مولکول های فلزی از جمله پتانسیل یونش، الکترون خواهی، گاف انرژی، الکترون گاتیوی، سختی، نرمی و ممان دوقطبی استفاده می شود. برای درک عملکرد نوری سامانه ها، طیف جذب آنها را در نواحی فرابنفش و فروسرخ، در چارچوب DFT وابسته به زمان بررسی می کنیم. نشان می دهیم که شش اتم فلزی مورد بررسی، توانایی تنظیم خواص نوری الکترونیکی کمپلکس های مولکولی را دارند.

واژه های کلیدی: کمپلکس های مولکولی آلی، کمپلکس کلرید فلزی، خواص الکترونیکی، طیف جذب، محاسبات نظریه تابعی چگالی

مقاله کامل در بخش انگلیسی همین شماره مجله به چاپ رسیده است.