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

عنوان مقاله:
مطالعه نظری توزیع شدت در ساختار ارتعاشی جهش الکترونی مجاز (فرمول درمتن مقاله) در مولکول سیس هگزاتری ان

محل انتشار:
دومین کنفرانس ملی رویکردهای نوین در آموزش و پژوهش (سال: 1396)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسنده:
فاطمه بوربور - *آموزش و پرورش شهرستان های استان تهران)ورامین(،گروه شیمی فوق لیسانس شیمی فیزیک*

خلاصه مقاله:
دراین تحقیق، روش حیطه زمان برای محاسبه ساختار ارتعاشی الکترونی طیف جذبی 11B1 11A1مولکول سیس 1،3،1 هگزاتریان در تقریب کوندون در دمای صفر کلوین به کار برده شده است. در این روش، طیف جذبی مولکولها را میتوان برحسب تبدیل فوریه توابع همبستگی زمانی مناسب به دست آورد که برای سطوح پتانسیل هماهنگ جابهجا شده تغییر شکل یافته چرخیده به شکل بسته محاسبه میشوند. بدین ترتیب، شدت نسبی اغلب نوار های ارتعاشی الکترونی را که در طیف جذبی ظاهر شدهاند، پیشبینی و با دادههای تجربی و نظری در دسترس مقایسه شده است. طیف حاصل عمدتا از نوارهایی شامل سه شیوه متقارن کامل v5 (کششی پیوند دوگانه ،(CC v9 (کششی پیوند ساده (CC و 12v (خمشی زاویهای اسکلتی) تشکیل می شود که از میان آنها 5v و 9 v شیوههای ارتعاشی هستند که طولانی ترین تسلسلها را بنا میکنند و بالاترین شدت را دارند؛ در صورتی که 21v فعالیت کمتری دارد. طیف، همچنین، نوارهای ترکیبی مانند 51 91 و 51 121 را نشان میدهد که به وسیله شیوههای a1 ایجاد میشوند.

کلمات کلیدی:
سیس هگزاتریان، طیف جذبی، تبدیل فوریه توابع همبستگی ، روش حیطه زمان

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/702014