Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

# Dielectric relaxation and molecular conformational energy of some arylazo benzothiazine derivatives.

Autorzy

Mirosław Kozłowski

Hubert A. Kołodziej

Robert Wieczorek

Zdzisław Latajka

A. Jurlewicz

Rok wydania

2000

Czasopismo

Chemical Physics

Numer woluminu

252

Strony

289-299

DOI

10.1016/S0301-0104(99)00364-X

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

We carry out semi-empirical calculations on some arylazo benzothiazine derivatives to obtain the energy barriers for internal rotation and dipole moments, using the PM3 Hamiltonian. By means of the correlation function method and some probabilistic procedures we describe then the dielectric relaxation of these molecules and we try to explain what the contribution of different relaxation modes is in the process of relaxation. Moreover, we account for the consequences of the nonrigidity of the molecules in dielectric response.

Słowa kluczowe

Dielectric relaxation, Dielectric absorption, Semi-empirical calculation, Relaxation mode

Adres publiczny

https://doi.org/10.1016/S0301-0104(99)00364-X

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-08 22:10:15

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/52ydJ2K.