



انتساب فرکانسهای ارتعاشی ۲ و ۵ - دی برومو پیریدین

مارال احمدی^{۱*}، سمانه اکبری^۲، مهناز پویا^۲

^۱ دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تهران جنوب، گروه مهندسی شیمی، تهران، ایران

^۲ دانشگاه آزاد اسلامی، واحد شاهرود، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی، شاهرود، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۹۲/۱/۲۳، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۹۲/۳/۱۹، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۹۲/۴/۵

چکیده

ساختار هندسی ۲ و ۵-دی برومو پیریدین با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی در سطح محاسباتی B3LYP با استفاده از تابع پایه 6-311G** بهینه سازی شده است. طیف ارتعاشی این مولکول نیز با استفاده از همین روش در سطح B3LYP، با به کار بردن تابع پایه 6-311G** محاسبه شده است. طیفهای FT-IR و FT-Raman ترکیب جامد به ترتیب در گستره های $4000 - 1000$ و $3500 - 100$ cm^{-1} ثبت شده اند. فرکانس های ارتعاشی نظری مقیاس شده و فرکانس های IR و Raman تجربی با هم مقایسه شده اند. فرکانسهای محاسبه شده و مشاهده شده در توافق خوبی با یکدیگر هستند. ساختار هندسی و طیف ارتعاشی ۲ و ۵-دی برومو پیریدین با مولکول مادر (پیریدین) نیز مقایسه شده اند.

واژه های کلیدی: ۲ و ۵-دی برومو پیریدین، انتساب ارتعاشی، FT-IR، FT-Raman

۱. مقدمه

کشها، و مواد دارویی دارد. پیریدین و مشتقات آن سمی، سرطان زا و مانع رشد و نمو بسیاری از ارگانیزم های زنده می شود. [۱]. در پیریدین، پیرازین و در مولکول های هتروسیکلیک شش عضوی، شبیه به بنزن رزونانس رخ می دهد که این امر باعث می شود مولکول به صورت مسطح و بسیار پایدار باشد. طیف ارتعاشی پیریدین و مشتقات پیریدین، موضوع چندین تحقیقات شده اند [۷-۲]. ترکیبات شامل حلقه پیریدین در طبیعت فراوان یافت می شوند. مثالهایی در این زمینه ویتامین B6 و نیکوتینامید آذین هستند که در

پیریدین به علت حضور در بسیاری از ساختارهای شیمیایی مورد نظر در زمینه های پزشکی و صنعتی به طور گسترده ای از نظر طیف سنجی مورد مطالعه قرار گرفته است. این مولکول عمدتاً به دلیل داشتن ساختاری مشابه بنزن بسیار مورد توجه بوده است. پیریدین یک ترکیب هتروسیکل آروماتیک با خواص بازی ضعیف، با بویی نامطبوع، و بسیار محلول در آب است. از این ترکیب به عنوان یک حلال صنعتی به ویژه برای واکنش دهیدروکلریناسیون استفاده شده و پتانسیل کاربرد در زمینه های ساخت رنگ ها، مواد انفجاری، آفت

* عهده دار مکاتبات: مارال احمدی

نشانی: دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تهران جنوب، گروه مهندسی شیمی، تهران، ایران.

تلفن: ۰۲۳-۳۲۳۹۴۲۸۹ پست الکترونیکی: maral.ah_m@yahoo.com

و تعداد اسکنهای میانگین گیری شده ۵۰۰ بوده است.

۳. نتایج و بحث

۳-۱. هندسه مولکول

هندسه های بهینه شده کامل پیریدین و ۲ و ۵-دی برومو پیریدین در شکل ۱ نمایش و پارامترهای ساختاری آنها در جدول ۱ فهرست شده اند. چنانکه در جدول ۱ نشان داده شده است، محاسبات در سطح B3LYP نشان می دهند که با جایگزینی Br طول پیوند C1-N6 به میزان قابل توجهی (۰/۰۲۲Å) کاهش می یابد. قابل توجه آن است که طولهای C1-C2، C2-C3، C3-C4، C4-C5 و C5-N6 به طور یک در میان افزایش و کاهش می یابند. این امر نشان می دهد که عدم استقرار الکترون در سیستم حلقه با جایگزین کردن اتم Br کاهش می یابد و خصلت پیوندهای ساده و دو گانه به طور یک در میان افزایش می یابد. کاهش طول پیوندهای C-H نیز با استخلاف Br به جای اتم H را نیز می توان به افزایش بار الکتریکی روی اتمهای C نسبت داد که به علت مثبت بودن بار روی اتمهای H باعث افزایش نیروی جاذبه کولومبی شده و طول پیوند کاهش می یابد.

۳-۲. تفسیر طیفهای ارتعاشی تجربی

فرکانسهای ارتعاشی تجربی و نظری همراه با انتساب آنها برای مولکول ۲ و ۵-دی برومو پیریدین در جدول ۲ فهرست شده اند. طیف مادون قرمز این مولکول در شکل ۲ و طیف رامان آن در شکل ۳ نشان داده شده اند. معمولاً فرکانسهای ارتعاشی محاسبه شده در موقعیت های متفاوتی نسبت به فرکانسهای متناظر مشاهده شده به دست می آیند. برای این عدم تطابق چند دلیل آورده شده است. یکی از این دلایل ناهماهنگ بودن فرکانسهای ارتعاشی است. در صورتی که برای محاسبه فرکانسهای محاسبه شده از روش نوسانگر هماهنگ استفاده می شود. دلیل دیگر محاسبه فرکانس در فاز گازی است در حالیکه فرکانسهای تجربی در فاز جامد محاسبه شده اند. معمولاً این اختلاف به طور سیستماتیک تغییر می کند لذا می توان با روش خوراندن ضرایب تصحیح را به دست آورد. با توجه به نتایج به دست آمده [۱۵] فرکانسهای بالاتر cm^{-1} ۲۰۰۰ را در ۰/۹۶۰۹ و فرکانسهای زیر cm^{-1} ۲۰۰۰ را در ۰/۹۸۵۹

حوزه های بیوشیمی و داروسازی بسیار مورد توجه قرار دارند [۸]. آمینو پیریدین و مشتقات آن گروهی از ترکیبات را شامل می شوند که به صورت معرف در شیمی تجزیه مورد استفاده قرار می گیرند برخی از آنها خواص بیهوش کننده داشته و به صورت دارو برای برخی از بیماریهای عصبی مغزی مورد استفاده قرار می گیرند [۹]. طیف بینی مادون قرمز، IR، و رامان روشهای کارایی برای بررسی ساختارهای الکترونی و هندسی مولکولها هستند و در مقیاس وسیعی برای مطالعه نتایج ساختاری مولکولها نظیر بررسی حرکتهای ارتعاشی، خمشی داخل صفحه و خارج از صفحه مورد استفاده قرار گرفته اند [۱۰].

در این مقاله تجزیه و تحلیل طیفهای ارتعاشی ۲ و ۵-دی برومو پیریدین، بر اساس محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) و طیف های رامان و زیر قرمز، مورد بررسی قرار می دهیم.

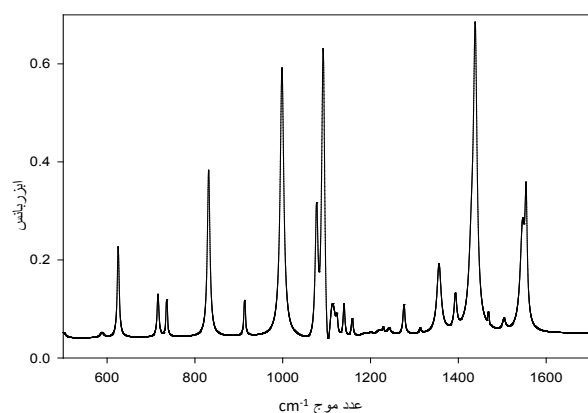
۲. روش های محاسباتی

کلیمه محاسبات با استفاده از نرم افزار Gaussian 03W [۱۱] و تجزیه و تحلیل طیفی به کمک نرم افزار GaussView 3.0 [۱۲] انجام گرفته است. بهینه سازی کامل هندسه مولکول در سطح B3LYP/6-311G** [۱۳-۱۴] به دست آمده است.

فرکانسهای ارتعاشی نیز در سطح B3LYP/6-311G** محاسبه شده اند. انتساب فرکانسهای تجربی نوارهای فرکانسی مشاهده شده در طیفهای ارتعاشی رامان و مادون قرمز با ارتباط یک به یک فرکانسهای مشاهده شده و محاسبه شده انجام گرفته است.

طیفهای مادون قرمز با استفاده از یک طیف نور سنج تبدیل فوریه Bomem MB-154 در گستره cm^{-1} ۴۰۰ - ۴۰۰۰ ثبت شده است. طیف زیر قرمز دور در گستره cm^{-1} ۶۰۰ - ۱۰۰ با استفاده از یک طیف سنج Thermo Nicolet NEXUS 870 FT-IR مجهز به دتکتور DTGS/polyethylene و یک مقسم نوری (beam splitter) لایه جامد انجام گرفته است. طیفها با قدرت تفکیک cm^{-1} 4 با جمع کردن ۶۴ اسکن حاصل شده اند.

طیف رامان با استفاده از یک آرایش پخش وارونه 180° و یک طیف نور سنج رامان تبدیل فوریه MB-154 با استفاده خط 1064 نانومتری لیزر Nd:YAG برای برانگیزش تهیه شده است. شدت لیزر 400 mW

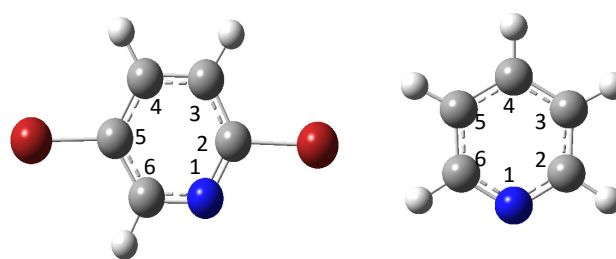


شکل ۲. طیف مادون قرمز ۲ و ۵-دی بروموپیریدین.

جدول ۲. فرکانسهای نظری و تجربی ارتعاشی مولکول ۵،۲-دی بروموپیریدین و انتساب شیوه های ارتعاشی a.

F	I _{IR}	A _R	IR	R	انتساب شیوه های نرمال ارتعاشی
۳۰۸۹	۰	۱۲۵	۳۱۰۱ (۹)	3100w	v _s CH _{3,4}
۳۰۷۲	۰	۵۶	۳۰۴۸ (۱)	3047 w	v _{as} CH _{3,4}
۳۰۵۹	۴	۷۹	۳۰۲۵ (۴۴)	3024 m	vCH ₆
۱۵۶۹	۱۹	۱۳	۱۵۵۵ (۴۰)	1554 w	8a
۱۵۶۰	۲۰	۲۶	۱۵۴۸ (۴۰)	1547 w	8b
۱۴۴۹	۱۵۸	۲	۱۴۳۹ (۹۷)		19a
۱۳۶۱	۳۴	۳	۱۳۵۸ (۲۴)	1276 w	19b
۱۲۹۰	۱	۴	۱۲۷۷ (۱۰)	1228 w	9a
۱۲۵۲	۰	۲			14
۱۱۳۷	۵	۲	۱۱۴۰ (۱۱)		18b
۱۰۹۴	۱۸۰	۰	۱۰۹۲ (۱۰۰)		18a
۱۰۷۸	۱۹	۴۵	۱۰۷۸ (۲۸)	1082 s	1
۱۰۰۰	۶۴	۲	۱۰۰۰ (۷۰)		12
۹۶۵	۰	۰			5
۹۲۴	۳	۰	۹۱۲ (۸)		10b
۸۲۳	۲۸	۰	۸۳۱ (۴۴)		10a
۷۳۹	۱	۱۷	۷۳۷ (۷)	736 s	6a
۷۲۰	۲	۰	۷۱۶ (۷)		4
۶۲۱	۴	۵	۶۲۶ (۱۶)	621 m	6b
۴۷۸	۷	۰	۴۸۲ (۱۶)		16b
۴۱۲	۵	۰			16a
۴۱۰	۲۵	۰			v _a C-Br
۳۱۴	۲	۱		318 m	δC-Br
۲۶۷	۰	۱		284 m	γC-Br
۲۱۱	۰	۹		215 vs	v _s C-Br
۱۶۱	۰	۰			δC-Br
۷۰	۰	۰			γC-Br

F^۳، فرکانس تصحیح شده I_{IR}، شدت IR □ A_R، فعالیت رامان، v، ارتعاش کششی، δ، خمش داخل صفحه، γ، خمش خارج صفحه، s، متقارن، as، نامتقارن.



شکل ۱. ساختار بهینه شده و شماره گذاری اتمهای ۵،۲-دی بروموپیریدین و پیریدین.

جدول ۱. مقایسه پارامترهای ساختاری پیریدین و ۲،۵-دی بروموپیریدین محاسبه شده در سطح B3LYP/6-311G**.

	۲،۵-دی بروموپیریدین	پیریدین
	BL (Å)	BL (Å)
۱/۳۹۵۴	C1-C2	۱/۳۹۳۶
۱/۳۸۸۹	C2-C3	۱/۳۹۱۶
۱/۳۹۲۸	C3-C4	۱/۳۹۱۶
۱/۳۹۰۸	C4-C5	۱/۳۹۳۶
۱/۳۳۷۰	C5-N6	۱/۳۳۶۶
۱/۳۱۴۴	N6-C1	۱/۳۳۶۶
۱/۹۲۴۳	C1-Br10	۱/۰۸۶۷
۱/۰۸۱۴	C2-H8	۱/۰۸۳۷
۱/۰۸۲۶	C3-H7	۱/۰۸۴۳
۱/۰۸۰۹	C4-Br11	۱/۰۸۳۷
۱/۰۸۴۱	C5-H9	۱/۰۸۶۷
	BA (°)	BA (°)
۱۱۸/۶	C2-C1-Br10	۱۲۰/۳
۱۲۱/۲	C4-C5-H9	۱۲۰/۳
۱۲۱/۲	C1-C2-H8	۱۲۰/۳
۱۲۰/۰	C5-C4-Br11	۱۲۰/۳
۱۱۷/۴	C1-C2-C3	۱۱۸/۵
۱۱۹/۴	C3-C4-C5	۱۱۸/۵
۱۱۸/۴	C2-C3-C4	۱۱۸/۵
۱۲۱/۳	C3-C2-H8	۱۲۱/۳
۱۲۰/۶	C3-C4-Br11	۱۲۱/۳
۱۲۰/۷	C2-C3-H7	۱۲۰/۷
۱۲۰/۹	C4-C3-H7	۱۲۰/۷
۱۲۴/۵	C2-C1-N6	۱۲۳/۷
۱۱۶/۹	N6-C1-Br10	۱۱۶/۰

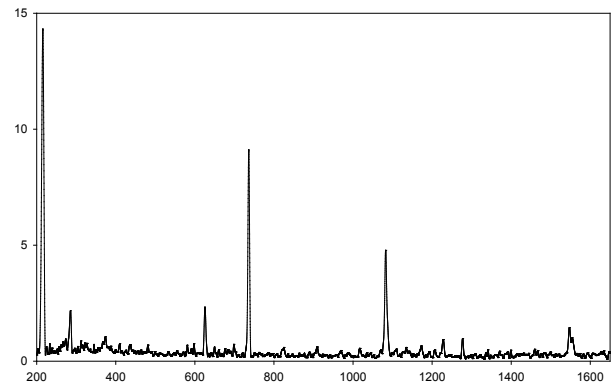
ضرب می کنیم. نتایج این محاسبات در جدول ۲ آورده شده است و چنانکه مشاهده می شود توافقی بسیار خوب بین نتایج تجربی و نظری وجود دارد. برای نمایش ارتعاشات پیریدین از رابطه ویلسون استفاده شده است [۱۶].

۳-۲-۱. ناحیه cm^{-1} ۳۲۰۰-۱۶۰۰

در این ناحیه انتظار داریم که نوارهای مربوط به ارتعاش های

به سمت اعداد موج بالاتر جابه جا می شوند. بررسی طیف ارتعاشی پیریدین به طور کامل دوتره شده موید این نظریه است. نوارهای مربوط به ارتعاشات 8a و 8b در طیف مادون قرمز d5- پیریدین به ترتیب در اعداد موج 1550 و 1537 cm^{-1} مشاهده شده اند [۱۷]. نوار بسیار قوی مشاهده شده در 1439 cm^{-1} در طیف مادون قرمز به حرکت ارتعاشی 19a نسبت داده شده است. عفیفی و همکاران فرکانس 1441 cm^{-1} [۲۲] و دیلا و همکاران [۲۳-۲۰]، وونگ و همکاران [۲۵-۲۸] و اوزونو و همکاران [۲۳] فرکانس 1483 cm^{-1} را به این حرکت نسبت داده اند که به نظر می رسد انتساب آخری صحیح باشد. در d5- پیریدین نیز این نوار جابه جایی زیادی به سمت اعداد موج کوچکتر نشان می دهد و در 1331 cm^{-1} مشاهده می شود [۲۰-۱۷]. این جابه جایی نیز نشان می دهد که حرکت های خمشی CH نیز نقش زیادی در این شیوه ارتعاشی بازی می کند. نوار ضعیف مشاهده شده در 1358 cm^{-1} در طیف IR ترکیب تحت مطالعه به حرکت 19b منتسب می شود. عفیفی و همکاران فرکانس 1482 cm^{-1} [۲۲] و دیلا و همکاران [۲۱-۱۸] 1437 cm^{-1} ، وونگ و همکاران [۲۴-۲۵] و کلوتس و همکاران [۲۶] فرکانس 1442 cm^{-1} را به این حرکت نسبت داده اند که به نظر می رسد انتساب آخری صحیح باشد. نوار جذبی بسیار قوی 1091 cm^{-1} مشاهده شده در طیف IR ۲ و ۵-دی برومو پیریدین به حرکت ارتعاشی 18a نسبت داده شده است. نوار 18a در پیریدین در حدود 1070 cm^{-1} گزارش شده است [۲۵-۱۷]. عدم تغییر مکان این نوار با استخلاف دو اتم هیدرژن با برم نشانه عدم جفت شدن آن با دیگر حرکت های مولکولی است. در d5- پیریدین این نوار در 824 cm^{-1} مشاهده شده است [۲۱-۲۴].

یک نوار بسیار قوی در طیف رامان، 1082 cm^{-1} ، مشاهده می شود. این نوار به حرکت تنفسی ۱ نسبت داده می شود. معادل این نوار در پیریدین گزارش شده است که در 999 cm^{-1} ظاهر می شود [۲۱-۱۸]. متناظر این نوار ارتعاشی در طیف IR در 1078 cm^{-1} در طیف IR ۲ و ۵-دی برومو پیریدین با شدت متوسط مشاهده شده است. نوار قوی 999 cm^{-1} مشاهده شده در طیف IR ۲ و ۵-دی برومو پیریدین به ارتعاش ۱۲ نسبت داده شد.



شکل ۳. طیف رامان ۵،۲-دی بروموپیریدین جامد.

پیوند C-H را مشاهده کنیم. در ترکیب ۲ و ۵-دی برومو پیریدین سه پیوند C-H داریم و بنابراین منتظر ظاهر شدن سه نوار ارتعاشی هستیم. نوار واقع در 3101 cm^{-1} هم در طیف مادون قرمز و هم در طیف رامان مشاهده می شود. این نوار همراه با نوار ارتعاشی در 3047 cm^{-1} در طیف رامان را به حرکت ارتعاشی کششی C2-H و C3-H نسبت داده ایم (جدول ۲). در طیف مادون قرمز یک نوار نسبتاً قوی نیز در 3024 cm^{-1} مشاهده می شود که به طور ضعیفی نیز در طیف رامان مشاهده شده است. این نوار را به حرکت کششی C6H نسبت داده ایم. چنانکه در شکل ۲ مشاهده می شود، در طیف IR تعداد زیادی نوار طیفی ضعیف در ناحیه $3000-2000$ cm^{-1} مشاهده می شوند که به اورتونهای حلقه پیریدین مربوطند.

۳-۲-۲. ناحیه $1000-1600$ cm^{-1}

در این ناحیه انتظار داریم که نوارهای مربوط به حرکت های کششی C-N، C-C، و حرکت خمشی داخل صفحه C-H مشاهده شوند. دو نوار در فرکانسهای 1554 و 1547 cm^{-1} با شدت نسبتاً متوسط در طیف زیر قرمز مشاهده می شوند که آنها را به ترتیب به 8a و 8b حلقه پیریدین در رابطه ویلسون نسبت داده ایم. فرکانسهای مشابه در طیف پیریدین در فاز گازی به ترتیب در گستره های اعداد موج $1583-1590$ و $1574-1580$ cm^{-1} گزارش شده اند [۱۷-۲۵] که در حدود $20-30$ cm^{-1} بالاتر از ترکیب مورد مطالعه قرار دارند. دلیل این امر را می توان به حذف دو اتم H که با Br جانشین شده اند مربوط دانست که در مولکول پیریدین این دو ارتعاش با حرکت های خمشی CH جفت می شوند و در نتیجه این دو فرکانس در پیریدین

- J. Mol. Struct.*, 470 (1998) 241.
- [8] V. Krishnakumar, S. Muthunatesan, *Spectrochim. Acta Part A*, 65 (2006) 818.
- [9] N. Sundaraganesan, S. Ilakiamani, B. Ananda, H. Saleem, B. Dominic Joshua, *Spectrochim. Acta Part A*, 64 (2006) 586.
- [10] V. Krishnakumar, R. John Xavier, *Spectrochim. Acta Part A*, 61 (2005) 253.
- [11] GAUSSIAN 98. Revision A. 3, M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, V.G. Zakrzewski, J.A. Montgomery, Jr., R.E. Stratmann, J.C. Burant, S. Dapprich, J.M. Millam, A.D. Daniels, K.N. Kudin, M.C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G.A. Petersson, P.Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J. Cioslowski, J.V. Ortiz, B.B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, J.L. Andres, C. Gonzalez, M. Head-Gordon, E.S. Replogle, J.A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, (1998).
- [12] GaussView 3.0: Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, (2003).
- [13] D. Becke, *J. Chem. Phys.*, 98 (1993) 5648.
- [14] C. Lee, W. Yang, R.G. Parr, *Phys. Rev. B*, 37 (1988) 875.
- [15] S.F. Tayyari, T. Bakhshi, S. Mehrani, E.R. Sammelson, *J. Mol. Struct.*, 938 (2009) 76.
- [16] E.B. Wilson, *Phys. Rev.*, 4 (1934) 706.
- [17] F. P. Urena, M. F. Gómez, J.J.L. González, E. M. Torres, *Spectrochim. Acta Part A*, 59 (2003) 2815.
- [18] H.D. Stidham, D.P. DiLella, *J. Raman Spectrosc.*, 8 (1979) 180.
- [19] D.P. DiLella, H.D. Stidham, *J. Raman Spectrosc.*, 9 (2) (1980) 90.
- [20] D.P. DiLella, *J. Raman Spectrosc.* 9 (4) (1980) 238.
- [21] H.D. Stidham, D.P. DiLella, *J. Raman Spectrosc.*, 9 (1980) 247.
- [22] M.S. Afifi, A.A. Shabana, *Analisis* 10 (5) (1982) 239.
- [23] Y. Ozono, M. Maehara, Y. Nibu, H. Shimada, R. Shimada, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 59 (1986) 1617.
- [24] Wong, S.D. Colson, *J. Phys. Chem.*, 87 (1983) 2102.
- [25] K.N. Wong, S.D. Colson, *J. Mol. Spectrosc.*, 104 (1984) 129.
- [26] T.D. Klots, *Spectrochim. Acta A*, 54 (1998) 1481.

۳-۲-۳ ناحیه زیر 1000 cm^{-1}

در این ناحیه انتظار داریم ارتعاشات مربوط به حرکات خمشی خارج از صفحه C-H و C-C را مشاهده کنیم. ارتعاشات 6a و 6b به صورت نوارهای نسبتاً قوی در طیف رامان به ترتیب در اعداد موج 737 cm^{-1} و 625 cm^{-1} مشاهده می شوند. معادل این ارتعاشات در پیریدین به ترتیب در 654 cm^{-1} و 603 cm^{-1} گزارش شده است [۲۱-۱۸] که نشان می دهد استخلاف در موقعیتهای ۲ و ۵ به شدت روی مکان جذب در این ارتعاشات تاثیر گذار است.

سه نوار فعال رامان در 318 ، 284 ، و 215 cm^{-1} را به ترتیب به حرکت خمشی داخل صفحه، حرکت خمشی خارج از صفحه و ارتعاش کششی مقارن C-Br نسبت داده ایم.

۴. نتیجه گیری

با استفاده از محاسبات نظری با روش نظریه تابعی چگالی ساختار و طیف ارتعاشی ۲ و ۵-دی برومو پیریدین مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. محاسبات نشان می دهند که با جانشینی اتمهای Br به جای اتمهای H در موقعیت های ۲ و ۵ عدم استقرار الکترون در حلقه پیریدین کاهش می یابد و طیف ارتعاشی به طور وسیعی تغییر می کند. تغییرات عمدتاً مربوط می شوند به جفت شدن حرکتیهای کششی C-C با ارتعاشات خمشی داخل و خارج از صفحه C-H.

۵. مراجع

- [1] S.N. Mudliar, K.V. Padoley, P. Bhatt, M. Sureshkumar, S.K. Lokhande, R.A. Pandey, N. Vaidya, *Biotechnol.*, 99 (2008) 1044.
- [2] A. Topaclic, S. Bayari, *Spectrochim. Acta Part A*, 57 (2001) 1385.
- [3] R.N. Medhi, R. Barman, K.C. Medhi, S.S. Jois, *Spectrochim. Acta Part A*, 56 (2000) 1523.
- [4] S.F. Tayyari, S.J. Mahdizadeh, S. Holakoei, Y.A. Wang, *J. Mol. Struct.*, 971 (2010) 39.
- [5] V. Krishnakumar, S. Muthunatesan, *Spectrochim. Acta Part A*, 65 (2006) 818.
- [6] A. Topacle, S. Bayari, *Spectrochim. Acta Part A*, 57 (2001) 1385.
- [7] I. Lopez Tocon, M.S. Woolley, J.C. Otero, J.J. Marcos,

