اولین همایش ملی نانوتکنولوژی مزایا و کاربردها
محل برگزاری : همدان دانشکده شهید مفتح
۱۵ اسفند ۱۳۹۲

تغییرات پارامترهای ساختاری مولکول نانوتیوب C0.5(BN)0.5 در برهم کنش با NO2به روش DFT

سمیرا صادقی* – شماره تماس: ۰۹۱۹۳۷۳۸۰۰۲

کارشناسی ارشد دانشگاه آزاد اسلامی واحد شاهرود پست الکترونیکی: samira_sadeghi29@yahoo.com

چکیده:

در نانوتیوب زیگزاگ (۱۰،۰) هیبرید شده پنج اتم بور با موقعیتهای مختلف در نظر گرفته شد که از لحاظ انرژی آمادگی بالایی جهت برهمکنش با اتم نیتروژن مولکول NO2 دارد طی برهمکنش این گاز با نانوتیوب هیبریدی C0.5(BN)0.5، مشخصات ساختاری و الکترونی نانوتیوب، دچار تغییرات میشود. در این تحقیق با استفاده از روش تئوری تابع چگالی تأثیرات مولکول NO2 روی اتمهای بور مولکول نانوتیوب در ۵ موقعیت (B35)(B28)(B20)(B12)(B4) مورد ارزیابی قرار گرفت. جذب مولکول NO2 روی اتم های بور مولکول نانوتیوب در ۵ موقعیت با استفاده از سطح محاسباتیB3LYP/6-31G* و به روش DFT مورد مطالعه قرار گرفت. در این تحقیق میزان این تغییرات و اتمهای بور مولکول نانوتیوب موضع جذب بر روی این تغییرات بررسی می‌شود. انرژی جذب، طول پیوندها، انتقال بار بین مولکول نانوتیوب و مولکول NO2 و فاصله جذب قبل و بعد از جذب مولکول NO2 مورد مطالعه قرار گرفت.

واژه های کلیدی: مولکول نانوتیوب، مولکول NO2، تئوری تابع چگالی (DFT)، طول پیوند، فاصله جذب.