اولین همایش ملی نانوتکنولوژی مزایا و کاربردها

محل برگزاری : همدان دانشکده شهید مفتح

۱۵ اسفند ۱۳۹۲

مطالعه تغییرات تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی (CSI) و انیزوتروپی (CSA) در اثر جذب مولکول NH3 بر روی نانوتیوب هیبریدی C-BN

[1]سمیرا صادقی* – شماره تماس: ۰۹۱۹۳۷۳۸۰۰۲

[2]مرجان عرب اسمعیلی – شماره تماس: ۰۹۱۲۲۷۳۵۶۴۸

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

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 وجود دارد که از لحاظ انرژی آمادگی بالایی جهت برهمکنش با اتم نیتروژن مولکول NH3 دارد طی برهمکنش این گاز با نانوتیوب هیبریدی، مشخصات ساختاری و الکترونی نانوتیوب، دچار تغییرات میشود. در این تحقیق با استفاده از روش تئوری تابع چگالی تأثیرات مولکول NH3 روی اتمهای بور مولکول نانوتیوب در ۵ موقعیت (B_{35}-B_{28}-B_{20}-B_{12}-B_4) مورد ارزیابی قرار گرفت. جذب مولکول NH3 روی اتم های بور مولکول نانوتیوب در ۵ موقعیت با استفاده از سطح محاسباتی*B3LYP/6-31G و به روش DFT مورد مطالعه قرار گرفت. تانسورهای پوشیدگی شیمیایی CS در سطح محاسباتی B3LYP/6-31G روی مولکول بهینه سازی شده C-BN و همچنین کمپلکس بهینه سازی شده NH3-(C-BN) در ۵ موقعیت جذب و به روشDFTمحاسبه گردید. محاسبات CSI و CSA نشان داد که جذب مولکول NH3 در ۵ موقعیت جذب روی مولکول C-BN تاثیرات متفاوتی روی ساختارهای الکتریکی مولکول نانوتیوب دارد.

واژه های کلیدی: مولکول نانوتیوب، مولکول NH3، تئوری تابع چگالی (DFT)، تانسورهای پوشیدگی شیمیایی ایزوتروپی، تانسورهای پوشیدگی شیمیایی انیزوتروپی.