بررسی برهمکنش مولکول نیترآمید بر روی سطح نانولوله گالیم نیترید آرمچیر (۴،۴) خالص و عاملدار شده با اتم پلاتین

دکتر مهدی رضایی صامتی[۱] ، سمانه بارانی پور[۲]

۱- دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، گروه شیمی، ملایر

پست الکترونیکی:mrsameti@gmail.com

۲- دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

Samaneh.barani90@gmail.com

چکیده: در این پژوهش، تأثیر عاملدار کردن نانولوله گالیم نیترید آرمچیر (۴،۴) به منظور یافتن حسگرهای حساس مناسب برای مولکول نیترآمید (NH_2NO_2) که یکی از عوامل آلودگی هواکره می باشد با استفاده از روش نظریه ی تابعی دانسیته (DFT) مورد بررسی قرار گرفته است. دراین روش ابتدا نانولوله ها را به روش B3LYP و پایه LAL2DZ به حداقل انرژی رسانده سپس پارامترهای انرژی جذب، توصیف گرهای کوانتومی، انرژی بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) و پایین ترین اوربیتال مولکولی اشباع نشده(LUMO) و در نهایت محاسبات NBO با روش pop=nbo انجام شد. نتایج انرژی جذب نشان می دهد تعامل قوی بین مولکول جاذب و نانولوله گالیم نیترید خالص و عاملدارشده می باشد. از سویی مطالعات اوربیتال های مولکولی، توصیف گر های کوانتومی و سایر پارامترها نشان می دهند که فرآیند جذب باعث کاهش گاف انرژی و کاهش سختی (افزایش نرمی) درنتیجه افزایش رسانایی نانولوله می شود. علاوه بر این نتایج پارامتر های NBO و نمودار های DOS نشان دهنده برهمکنش مطلوب بین نانولوله و مولکول جاذب وجود دارد. بنابراین نانولوله گالیم نیترید آرمچیر (۴،۴) خالص و عاملدار شده با اتم پلاتین گزینه مناسبی برای شناسایی مولکول آلاینده نیترآمید است.

واژه های کلیدی : محاسبات تابعی دانسیته، نانولوله های گالیم نیترید (۴،۴) ، مولکول نیترآمید، انرژی های جذب، عاملدار شده با اتم پلاتین

KEY WORDS: Density functional calculation, gallium nitride nanotubes (4,4) , nitramide molecule, Adsorption energies, Pt functionalized