

## مقایسه تئوری رفتار ساختاری و الکترونی مولکول های بهینه نانو لوله بور نیتريد (5,9-9) و نانو لوله آلومینیوم نیتريد (5,9-9)

مهرنوش خالقیان<sup>۱\*</sup>، فاطمه آذرخشی<sup>۲</sup>

۱- دانشگاه آزاد اسلامی، واحد اسلامشهر، باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، اسلامشهر، ایران

۲- گروه شیمی، واحد ورامین- پیشوا، دانشگاه آزاد اسلامی، ورامین، ایران

### خلاصه

در پژوهش حاضر از نانولوله بور نیتريد (9,9) B45N45H36 و آلومینیوم نیتريد (9,9) Al45N45H36 با طول ۵ آنگستروم استفاده شده که در آن رسانایی، بر خلاف نانولوله های کربنی، به نوع نانولوله بستگی چندانی ندارد. روش مورد استفاده در این پژوهش، تئوری تابعی چگالی در سطح نظری \*B3LYP/6-31G است. ابتدا نمونه مورد مطالعه شبیه سازی شده و سپس با استفاده از نرم افزار گوسین ساختار بهینه شده آن بدست آمده است. و پارامترهای ساختاری هر یک از نانو لوله ها در قالب ۵ لایه تعیین گردید. و از آنجایی که یکی از ابزارهای قوی برای شناسایی ساختار الکترونی و رفتار دینامیکی مواد، استفاده از طیف NMR است، پارامترهای طیف سنجی رزونانس مغناطیسی هسته در ساختارهای بهینه شده محاسبه گردید.

**کلمات کلیدی:** تئوری تابعی چگالی، نانو لوله، بور نیتريد، آلومینیوم نیتريد، رزونانس مغناطیسی هسته، ساختار الکترونی

### ۱. مقدمه

برای اولین بار نانولوله های نیتريد بور به شکل تئوری و از طریق محاسبات نظری توسط روبیو و همکاران در سال ۱۹۹۴ پیش بینی شد و در سال ۱۹۹۵ توسط چوپرا و همکاران به شکل نانولوله های نیتريدبور خالص سنتز شد. باتوجه به خواص شگفت انگیز شیمیایی، نوری، الکتریکی، گرمایی و مکانیکی یک ماده شناخته شده در صنعت پلیمر، پزشکی، الکترونیک، برق و فضا محسوب می شود [۱و۲]. نانو لوله های نیتريد بور دارای گستره ی وسیعی از نیمه رسانا ها هستند و خواص الکتریکی آنها نزدیک به عایق هاست که می توان با استفاده از میکروسکوپ STM آنها را شبیه سازی و توصیف کرد. در سال ۲۰۱۴، واکنش نانولوله های نیتريد بور و نانولوله های آلومینیوم دوپ شده آن را با داروهای ضد سرطان دارای پلاتین مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان می دهد که جذب به روی اتم آلومینیوم به خوبی انجام شده است. بنابراین نانولوله های نیتريد بور با آلومینیوم دوپ شده به عنوان حامل های دارویی مناسبی می باشند [۳]. در سال ۲۰۱۲ با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتومی نشان دادند که برخلاف نانولوله های کربنی، نانولوله های نیتريد آلومینیوم می توانند در شناسایی گاز سمی فرمالدهید مورد استفاده قرار گیرند. در این کار ابتدا جذب گاز با جهت گیری های مختلف بر روی نانولوله ها انجام گرفت سپس تأثیر جذب