اولین همایش ملی نانوتکنولوژی مزایا و کاربردها

محل برگزاری : همدان دانشکده شهید مفتح

۱۵ اسفند ۱۳۹۲

مطالعه تئوری جذب مولکول NH3 بر روی نانوتیوب هیبریدی C-BN به روش DFT

[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. 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 NH3 و فاصله جذب قبل و بعد از جذب مولکول NH3 مورد مطالعه قرار گرفت.

واژه های کلیدی: مولکول نانوتیوب، مولکول NH3، تئوری تابع چگالی (DFT)، طول پیوند، فاصله جذب.