

مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۵، شماره ۳، پاییز ۹۴

## برهم کنش بین گاز $F_2$ با حالت خالص و جایگزین شده $^{13}C$ آرمیچر (۴و۴) نانو لوله بورن فسفید: مطالعه DFT

مهدي رضايي صامتي و عترت السادات دادفر

گروه شیمی فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر

پست الکترونیکی: mrsameti@maleru.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۳/۸/۲۲ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۴/۵/۱۹)

### چکیده

در این تحقیق، ساختار پارامترهای کوانتومی و NQR فرایند جذب گاز  $F_2$  بر روی مدل‌های خالص و جایگزین شده با سه کربن نانو لوله بورن فسفید با استفاده از نظریه تابع چگالی بررسی شده است. برای این منظور در ابتدا چهار مدل برای جذب  $F_2$  بر روی سطح داخلی و خارجی حالت خالص و جایگزین شده با سه کربن را در نظر گرفته و سپس تمام ساختارها بهینه می‌شوند. ساختارهای بهینه شده برای محاسبه پارامترهای کوانتومی و NQR استفاده شده‌اند.

نتایج حاصل از محاسبات نشان می‌دهند که انرژی جذب مدل‌های حالت خالص و جایگزین شده با سه کربن BPNTs گرماده بوده و فرایند جذب از نوع فرایند فیزیکی است که مربوط به برهم کنش واندروالسی است. جایگزینی سه اتم کربن به جای بور باعث کاهش انرژی جذب می‌شود. جذب  $F_2$  و جایگزینی سه اتم کربن باند گاف، سختی کروی و پتانسیل یونش BPNTs از مقدار اولیه‌اش را کاهش می‌دهد. نتایج حاصل از پارامترهای NQR محاسبه شده در تمام مدل‌ها نشان می‌دهد که مقادیر CQ و Q اولین لایه بیشتر از سایر لایه‌ها است.

واژه‌های کلیدی: NQR، BPNTs، جذب  $F_2$ ،  $^{13}C$ -doped، DFT.

مقاله کامل در بخش انگلیسی همین شماره مجله به چاپ رسیده است.