

رابطه بین پوشیدگی های شیمیایی و مغناطیس پذیری در نانولوله کربنی تک جداره زیگزاگ (۵,۰) تغلیظ شده با پتاسیم

فرخ رؤیا نیکمram، رسول نجفپور و جمشید نجفپور

گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، واحد یادگار امام خمینی (ره) شهر ری، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران

پست الکترونیکی: j_najafpour@iausr.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۹/۱۱؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۹/۴/۲۲)

چکیده

در این تحقیق، ارتباط بین پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d)، پوشیدگی پارامغناطیسی کل ($\sigma_p + \sigma'_p$) و پوشیدگی همسانگرد شیمیایی $^{13}\text{C}(\sigma_{\text{iso}})$ با بارهای اتمی مولیکن، NBO و QTAIM و نیز ارتباط پوشیدگی های شیمیایی با مغناطیس پذیری ها در نانولوله کربنی تک جداره زیگزاگ (۵,۰) با تغلیظ پتاسیم و بدون پتاسیم، با استفاده از نظریه تابعی چگالی، تحت شرط مرزی دوره ای (PBC) در سطح محاسباتی PBE/6-31G(d) بررسی شده است. نتایج نشان می دهد که نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) با تغلیظ پتاسیم، به نانولوله کربنی پایدارتر نوع N تبدیل می شود. رابطه خطی بین بارهای اتمی مولیکن، NBO و QTAIM با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی $^{13}\text{C}(\sigma_{\text{iso}})$ و پوشیدگی دیامغناطیسی σ_d در ساختارهای با پتاسیم و بدون پتاسیم، وجود دارد. پوشیدگی پارامغناطیسی کل ($\sigma_p + \sigma'_p$) با هیچ یک از بارها در ساختارهای با تغلیظ پتاسیم، ارتباط خطی ندارد. بین مغناطیس پذیری کل اتمی ($\chi(\Omega)$) با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی $^{13}\text{C}(\sigma_{\text{iso}})$ ارتباط کاملاً خطی در هر دو ساختار با پتاسیم و بدون پتاسیم برقرار است.

واژه های کلیدی: نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰)، تغلیظ پتاسیم، پوشیدگی مغناطیسی، بار اتمی مولیکن، بار اتمی NBO، بار اتمی QTAIM،

مغناطیس پذیری

۱. مقدمه

کرد که در آنها اتصالات مغناطیسی و الکتریکی از هم جدا شده اند. اتصال مغناطیسی را می توان برای قطبی کردن مغناطیسی نانولوله ها (دستکاری در اسپین ها) به کار برد و از اتصال های غیر مغناطیسی برای الکترودهای ولتاژ- جریان استفاده کرد. به نظر می رسد که مغناطیس پذیری درون اتمی تحت تأثیر بارهای اتمی در حوزه های اتمی و همچنین

مطالعات صورت گرفته توسط محققین نشان داده که برخی نانولوله های کربنی خاصیت دیامغناطیسی دارند. با قرار دادن یک نانولوله در زیر لایه مغناطیسی یا با افزودن الکترون یا حفره به نانولوله می توان خاصیت مغناطیسی در نانولوله ایجاد کرد. این خاصیت باعث می شود که بتوان ساخت وسایلی را پیش بینی

پوشیدگی دیامغناطیسی اتم‌های کربن باشند.

طبق نظریه QTAIM^۱، یک اتم همانند دستگاهی باز است که می‌تواند انرژی و الکترون‌ها را با حوزه‌های مجاور مبادله کند. این تئوری از مشخصات توپولوژی گرادینان چگالی الکترونی برای توضیح بسیاری از مفاهیم شیمیایی، مخصوصاً در نواحی پیوندی، استفاده کرده است. تانسور مغناطیس‌پذیری مرتبه دوم، χ ، در دستگاهی که در میدان مغناطیسی خارجی B قرار گرفته، بر حسب چگالی جریان القاء شده $J(r)$ در معادله زیر بیان می‌شود [۱]:

$$\chi = \frac{1}{rcB} \int r \times J(r) dr, \quad (1)$$

روش‌های محاسبه نسبتاً دقیق توزیع چگالی جریان القاء شده مرتبه اول $J(r)$ و خواص مرتبط با آن، مانند تانسورهای مغناطیس‌پذیری [۲] و تانسورهای پوشیدگی، توسط کیست و بیسدر [۳ و ۴] توسعه یافته‌اند. مغناطیس‌پذیری کل اتمی دیدگاهی کلی نسبت به جمع چگالی جریان الکترونی در حوزه اتمی و حوزه‌های بین اتمی ایجاد می‌کند. برای یک حوزه اتمی، مغناطیس‌پذیری بر حسب چگالی جریان القاء شده $J(r)$ به صورت درون حوزه اتمی (یعنی مغناطیس‌پذیری درون اتمی) و شار چگالی جریان از میان سطوح بین اتمی در میان آن اتم و اتم‌های مجاور پیوند شده به آن (یعنی تانسور مغناطیس‌پذیری بین اتمی یا مغناطیس‌پذیری پیوند) بیان می‌شود [۵]. در دستگاه‌های یونی و قطبی، شار چگالی جریان در حوزه اتمی تمرکز یافته و سهم مغناطیس‌پذیری بین اتمی به مغناطیس‌پذیری اتم بسیار ناچیز است. از سوی دیگر، در مولکول‌های دارای پیوند کووالانسی، سهم مغناطیس‌پذیری پیوند به مغناطیس‌پذیری کل اتمی بزرگ است و در برخی موارد، مانند مولکول‌های آروماتیک، حتی فراتر از مغناطیس‌پذیری درون اتمی است [۶-۸]. در کارهای قبلی، همبستگی بین پارامترهای 2NMR و بار اتمی در اوربیتال پیوند طبیعی

(NBO)^۳ برای نانولوله‌های کربنی صندلی و شکل‌های متصل شده آنها به ترانزیستور مولکولی گونه‌های PNP یا NPN در سطح محاسباتی B₃LYP/6-31G مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته و وجود ۴ نوع اتم کربن در نانولوله‌های کربنی صندلی^۴ (۳،۳) اثبات شده است. با این حال وقتی که اتصالاتی از نوع PNP یا NPN به نانولوله‌های کربنی صندلی^۴ (۳،۳) متصل می‌شود، ساختار الکترونی آن مختل می‌شود [۹].

در تحقیقی دیگر، از NBO و QTAIM به عنوان کمیت قابل مشاهده مکانیک کوانتومی، برای به دست آوردن بار اتمی استفاده شده تا ویژگی‌های شیمیایی خوشه‌های کربنی تک دیواره نانولوله‌های کربنی صندلی^۴ (۳،۳)، (۴،۴) و (۵،۵) در سطح B₃LYP با مجموعه پایه‌های 6-31G و 6-311+G(d) به دست آید. نتایج این تحقیق، ارتباط بین بار اتمی طبیعی NBO و همچنین بار اتمی QTAIM و جابه‌جایی شیمیایی^{۱۳C} در نانولوله‌های کربنی تک دیواره صندلی^۴ (۳،۳) و (۴،۴) را نشان می‌دهد. افزایش بار اتمی به مقدار مثبت بیشتر در NBO با افزایش جابه‌جایی شیمیایی^{۱۳C} همراه است. در مقابل، افزایش بار اتمی در حوزه اتمی به دست آمده در چارچوب QTAIM، به مقادیر مثبت‌تر با کاهش جابه‌جایی شیمیایی^{۱۳C} همراه است [۱۰].

در مطالعه نظری دیگری، رابطه بین مغناطیس‌پذیری و جابه‌جایی شیمیایی برای نانولوله‌های کربنی صندلی^۴ (۳،۳)، کایرال (۴،۳) و زیگزاگ (۶،۰) با اتصالاتی از نوع PNP یا NPN بررسی شده که در آن انتهای نانولوله‌ها با اتم‌های بور و نیتروژن به شکل یک پل از نوع اتصال PNP یا NPN آ شده‌اند. مقادیر بار اتمی، مغناطیس‌پذیری و جابه‌جایی شیمیایی^{۱۳C} این ساختارها به روش RHF و B₃LYP همراه با مجموعه پایه‌های 3-21G و 6-31G به دست آمده است. در این مطالعه ثابت شده که مغناطیس‌پذیری کل اتمی یک ارتباط نسبتاً خطی با جابه‌جایی شیمیایی^{۱۳C} در

۱. Quantum Theory of Atom in Molecule

۲. Nuclear Magnetic Resonance (NMR)

۳. Natural Bond Orbitals (NBO)

نظریه تابعی چگالی^۳ (DFT) در سطح محاسباتی PBE/6-31G(d) بهینه‌سازی شده‌اند. محاسبات بسامدهای ارتعاشی IR^۴ با مطالعه مشتقات دوم انرژی کل برای تشخیص پایدارترین هندسه (با بسامدهای حقیقی) انجام شده است. محاسبات NMR بر اساس روش معیار اوربیتال اتمی^۵ (GIAO)، برای به دست آوردن پوشیدگی شیمیایی همسانگرد $^{13}\text{C}(\sigma_{\text{iso}})$ صورت گرفته و تجزیه و تحلیل بار اتمی مولیکن^۶ و بار NBO با استفاده از نرم افزار Gaussian^۹ در همین سطح محاسباتی، دنبال شده‌اند. محاسبات مربوط به تحلیل چگالی الکترونی و تقسیم آنها به زیر دستگاه‌ها در قالب نظریه کوانتومی اتم در مولکول، QTAIM، جهت تعیین انرژی اتمی در سطح محاسباتی PBE/6-31G(d) به کمک نرم‌افزار [۱۷] AIMALL انجام گرفته است. برای محاسبه انرژی اتمی، ابتدا فایل‌های FCHK با نرم افزار Gaussian^۹ تولید شده سپس با استفاده از بسته نرم‌افزاری AIMALL فایل‌های WFX به دست آمده‌اند. مغناطیس‌پذیری درون اتمی $(\chi(\Omega)^{\text{intra}})$ و بین اتمی $(\chi(C/\Omega))$ و کل اتمی $(\chi(\Omega))$ ، با روش انتگرال‌گیری proaim، موجود در بسته نرم‌افزاری AIMALL محاسبه شدند. همه مغناطیس‌پذیری‌ها به طور مستقیم در خروجی AIMALL (فایل SUM) گزارش شده‌اند. دقت عمل انتگرال‌گیری‌ها با حفظ انتگرال اتمی مربوط به لاپلاسی هر حوزه اتمی به مقدار کمتر و مساوی 10^{-5} واحد اتمی (به جز اتم‌های C، C_v در نانولوله کربنی (۵،۰) با اثر تغلیظ دو پتاسیم با انتگرال اتمی مربوط به لاپلاسی به مقدار 10^{-4} واحد اتمی)، تضمین شده است. علاوه بر این، مجموع انرژی تمام زیر دستگاه‌ها در یک مولکول با کل انرژی هر مولکول مقایسه شده اند تا اطمینان حاصل شود که خطای انتگرال‌گیری QTAIM زیر دقت شیمیایی 1 kcal. mol^{-1} است. تحلیل QTAIM انرژی تک تک اتم‌ها را نتیجه می‌دهد [۱۸]. شکل ۳ نانولوله کربنی تک دیواره (۵،۰) بدون پتاسیم و با تغلیظ پتاسیم از خروجی محاسبه

نانولوله‌های کربنی کایرال (۴،۳) و زیگزاگ (۶،۰) و گونه‌های متصل شده آن به گروه‌هایی از نوع PNP یا NPN دارد به طوری که ضرایب رگرسیون در نانولوله‌های مدل کایرال و زیگزاگ بیش از ۰/۹ است. اما در نانولوله‌های کربنی صندلی (۳،۳) رابطه خطی بین جابه‌جایی شیمیایی و مغناطیس‌پذیری کل وجود ندارد. همچنین رابطه‌ای ضعیف بین جابه‌جایی شیمیایی و مغناطیس‌پذیری کل در نانولوله‌های کربنی صندلی متصل به گروه‌های PNP و NPN وجود دارد. البته در نانولوله‌های کربنی و گونه‌های متصل شده آنها به نیمه‌هادی‌های PNP و NPN، افزایش جابه‌جایی شیمیایی در اتم‌های کربن با افزایش مغناطیس‌پذیری کل همخوانی دارد [۱۱-۱۲].

در یک مطالعه علمی، کیونگ یانگ چان و همکارانش، اثر تغلیظ پتاسیم در نانولوله‌های کربنی دو دیواره^۱ (DWCNT) در دمای اتاق را به طور تجربی بررسی کرده‌اند. تغلیظ شیمیایی پتاسیم در دمای اتاق به شدت بر تکمیل بلوری و میزان نقص DWCNT ها تأثیر می‌گذارد. تغلیظ پتاسیم نشان دهنده یک فعل و انفعال انتقال بار قوی با اتم کربن و اکسیژن است. DWCNT های تغلیظ شده با پتاسیم، میدان الکتریکی کمتر و چگالی جریان بالاتری را در مقایسه با DWCNT های تغلیظ نشده با پتاسیم نشان می‌دهد [۱۳]. همچنین سالواتو و همکارانش اثر تغلیظ پتاسیم را بر خواص مقاومت مغناطیسی در برابر میدان مغناطیسی بیرونی در لیاف همسان نانولوله تک دیواره مطالعه کرده‌اند [۱۴].

۲. روش محاسبات

نانو لوله کربنی تک دیواره (۵،۰) بدون پتاسیم، شکل ۱ و با تغلیظ پتاسیم، شکل ۲، با نرم افزار nanotube modeler [۱۵] طراحی و نانولوله‌های مورد نظر با استفاده از نرم افزار Gaussian^۹ [۱۶] با شرط مرزی دوره‌ای^۲ (PBC) با استفاده از

۳. Density Functional Theory

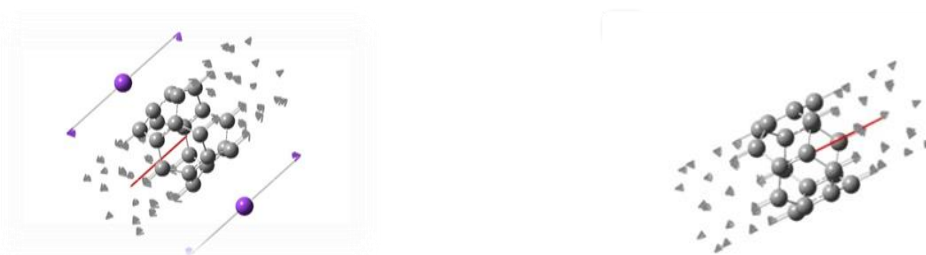
۴. Infrared (IR)

۵. Gauge Including Atomic Orbitals

۶. Mulliken

۱. Double-walled carbon nanotube

۲. Periodic Boundary Conditions (PBC)



شکل ۱. نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) بهینه‌سازی شده با شرط مرزی دوره‌ای (PBC).
شکل ۲. نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) بهینه‌سازی شده با تغلیظ (PBC) با شرط مرزی دوره‌ای (PBC).



شکل ۳. (الف) نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) و (ب) نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) با استفاده از تغلیظ دو پتاسیم، با شرط مرزی دوره‌ای در سطح محاسباتی PBE/PBE/6-31G(d) حاصل از محاسبات QAIM.

جدول ۱. انرژی کل (E) و نوار شکاف به صورت تفاوت‌های نسبی در انرژی‌های HOMO و LUMO (LUMO-HOMO) در نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) با استفاده از اثر تغلیظ پتاسیم و بدون استفاده از اثر تغلیظ پتاسیم در سطح محاسباتی PBE/PBE/6-31G(d).

$\Delta E_{(LUMO-HOMO)}$ /eV (kcal/mol)	E_{HOMO} /eV	E_{LUMO} /eV	E_{tot} /a.u.	ساختار
۰٫۳۴ (۷٫۸)	-۰٫۲۲	-۰٫۲۱	-۷۶۰٫۱۲۷۲۹	نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰)
۰٫۲۶ (۶٫۰)	-۰٫۱۳	-۰٫۱۲	-۱۹۵۹٫۵۹۷۴۶	نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) تغلیظ شده با پتاسیم

پوشیدگی‌های دیامغناطیسی (σ_d)، پوشیدگی‌های پارامغناطیسی اختلال نیافته (σ_p)، پوشیدگی‌های پارامغناطیسی اختلال یافته (σ_p)، پوشیدگی پارامغناطیسی کل ($\sigma_p + \sigma'_p$) و پوشیدگی همسانگرد شیمیایی (σ_{iso}) ^{13}C با استفاده از محاسبات NMR تقریب GIAO را در سطح محاسباتی PBE/PBE/6-31G(d) برای نانولوله‌های کربنی زیگزاگ (۵,۰) به ترتیب بدون تغلیظ پتاسیم و با تغلیظ پتاسیم با شرط مرزی دوره‌ای PBC داده است. جدول ۴ مقادیر مغناطیس پذیری همسانگرد درون

AIMALL را نشان می‌دهد.

۳. نتایج و بحث

جدول ۱ انرژی کل دستگاه، انرژی LUMO، انرژی HOMO و نوار شکاف انرژی را برای نانولوله کربنی تک دیواره زیگزاگ (۵,۰) بدون تغلیظ پتاسیم و با تغلیظ پتاسیم با شرط مرزی دوره‌ای PBC در سطح محاسباتی PBE/PBE/6-31G(d) را داده است. جداول ۲ و ۳ بارهای اتمی مولیکن، NBO و QAIM،

جدول ۲. بارهای اتمی مولیکن، QTAIM، NBO، پوشیدگی‌های دیامغناطیسی (σ_d)، پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال نیافته (σ_p)، پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال یافته (σ_p)، پوشیدگی پارامغناطیسی کل ($\sigma_p + \sigma'_p$) و پوشیدگی همسانگرد شیمیایی (σ_{iso}) ^{13}C در نانولوله‌های کربنی زیگزاگ ($5,0$) بدون تغلیظ پتاسیم.

Atom	Charge Mulliken	Charge NBO	Charge QTAIM	σ_d	σ_p	σ'_p	$\sigma_p + \sigma'_p$	σ_{iso}
C ₁	-۰,۰۲۲۵	-۰,۲۱۴۵	-۰,۰۱۱۴	۲۵۷,۲۰	۲۵,۷۶	-۲۸۵,۱۲	-۲۵۹,۳۶	-۱۲,۹۱
C _۲	۰,۰۲۱۵	۰,۲۱۴۸	۰,۰۱۱۲	۲۵۶,۳۲	۱۸,۶۴	-۴۷,۵۴۴	-۲۸۹,۰	-۲۱۸,۵۷
C _۳	-۰,۰۲۲۵	-۰,۲۱۴۵	-۰,۰۱۱۴	۲۵۷,۲۰	۲۵,۷۶	-۲۸۵,۱۲	-۲۵۹,۳۶	-۱۲,۹۱
C _۴	۰,۰۲۱۵	۰,۲۱۴۸	۰,۰۱۱۲	۲۵۶,۳۲	۱۸,۶۴	-۴۴۷,۵۵	-۴۲۸,۹۱	-۲۱۸,۵۸
C _۵	-۰,۰۱۵۶	-۰,۲۱۴۷	-۰,۰۰۷۳	۲۵۷,۱۹	۲۵,۶۷	-۲۸۴,۶۶	-۲۵۸,۹۹	۰,۲۷
C _۶	۰,۰۱۹۰	۰,۲۱۴۷	۰,۰۰۹۹	۲۵۶,۳۲	۱۸,۶۳	-۴۴۷,۴۱	-۴۲۸,۷۸	-۱۷۷,۸۹
C _۷	-۰,۰۱۵۶	-۰,۲۱۴۷	-۰,۰۰۷۳	۲۵۷,۱۹	۲۵,۶۷	-۲۸۴,۶۶	-۲۵۸,۹۹	۰,۲۷
C _۸	۰,۰۱۹۰	۰,۲۱۴۸	۰,۰۰۹۹	۲۵۶,۳۲	۱۸,۶۳	-۴۴۷,۴۱	-۴۲۸,۷۸	-۱۷۷,۸۸
C _۹	-۰,۰۲۲۴	-۰,۲۱۴۸	-۰,۰۱۱۱	۲۵۷,۱۹	۲۵,۶۵	-۲۸۴,۴۲	-۲۵۸,۷۷	-۱۲,۵۸
C _{۱۰}	۰,۰۱۸۸	۰,۲۱۴۵	۰,۰۰۹۱	۲۵۶,۳۲	۱۸,۶۱	-۴۴۶,۴۲	-۴۲۷,۸۱	-۱۷۴,۶۳
C _{۱۱}	-۰,۰۲۲۴	-۰,۲۱۴۸	-۰,۰۱۱۱	۲۵۷,۱۹	۲۵,۶۵	-۲۸۴,۴۲	-۲۵۸,۷۷	-۱۲,۵۸
C _{۱۲}	۰,۰۱۸۸	۰,۲۱۴۵	۰,۰۰۹۱	۲۵۶,۳۲	۱۸,۶۱	-۴۴۶,۴۲	-۴۲۷,۸۱	-۱۷۴,۶۲
C _{۱۳}	-۰,۰۱۹۳	-۰,۲۱۴۷	-۰,۰۰۹۴	۲۵۷,۱۹	۲۵,۶۴	-۲۸۴,۴	-۲۵۸,۷۶	-۵,۷۸
C _{۱۴}	۰,۰۲۱۷	۰,۲۱۴۹	۰,۰۱۱۶	۲۵۶,۳۲	۱۸,۶۱	-۴۴۶,۷۹	-۴۲۸,۱۸	-۲۲۰,۵۴
C _{۱۵}	-۰,۰۱۹۳	-۰,۲۱۴۷	-۰,۰۰۹۴	۲۵۷,۱۹	۲۵,۶۴	-۲۸۴,۴	-۲۵۸,۷۶	-۵,۷۸
C _{۱۶}	۰,۰۲۱۷	۰,۲۱۴۹	۰,۰۱۱۶	۲۵۶,۳۲	۱۸,۶۱	-۴۴۶,۷۹	-۴۲۸,۱۸	-۲۲۰,۵۵
C _{۱۷}	-۰,۰۱۹۰	-۰,۲۱۴۷	-۰,۰۰۹۰	۲۵۷,۱۹	۲۵,۶۹	-۲۸۴,۷	-۲۵۹,۰۱	-۴,۹۷
C _{۱۸}	۰,۰۱۷۷	۰,۲۱۴۵	۰,۰۰۶۵	۲۵۶,۳۲	۱۸,۶۰	-۴۴۶,۳۶	-۴۲۷,۷۶	-۱۶۷,۱۰
C _{۱۹}	-۰,۰۱۹۰	-۰,۲۱۴۷	-۰,۰۰۹۰	۲۵۷,۱۹	۲۵,۶۹	-۲۸۴,۷	-۲۵۹,۰۱	-۴,۹۷
C _{۲۰}	۰,۰۱۷۷	۰,۲۱۴۵	۰,۰۰۶۵	۲۵۶,۳۲	۱۸,۶۰	-۴۴۶,۳۶	-۴۲۷,۷۶	-۱۶۷,۱۰

استفاده از آن با شرط مرزی دوره‌ای با استفاده از تقریب GIAO و در سطح محاسباتی PBE/PBE/6-31G(d) در برابر بار اتمی و در شکل‌های ۴ تا ۶ و در برابر بارهای اتمی مولیکن و QTAIM در شکل‌های S1 تا S12 در اطلاعات ضمیمه ارائه شده NBO در شکل‌های S1 تا S12 در اطلاعات ضمیمه ارائه شده است. نمودارهای پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d)، پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال نیافته (σ_p)، پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال یافته (σ_p)، پوشیدگی پارامغناطیسی کل ($\sigma_p + \sigma'_p$) و پوشیدگی همسانگرد (σ_{iso}) ^{13}C در نانولوله کربنی زیگزاگ ($5,0$) با استفاده از تغلیظ پتاسیم و بدون استفاده از آن با شرط مرزی دوره‌ای PBC با استفاده از تقریب GIAO و در سطح

اتمی^۱ ($\chi(\Omega)^{intra}$)، مغناطیس پذیری همسانگرد بین اتمی^۲ ($\chi(C|\Omega)$) و مغناطیس پذیری همسانگرد کل اتمی^۳ ($\chi(\Omega)$) را برای نانولوله کربنی تک دیواره زیگزاگ ($5,0$) بدون تغلیظ پتاسیم و با تغلیظ پتاسیم با شرط مرزی دوره‌ای PBC در سطح محاسباتی PBE/PBE/6-31G(d) داده است.

نمودارهای پوشیدگی همسانگرد (σ_{iso}) ^{13}C ، پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d) و پوشیدگی پارامغناطیسی ($\sigma_p + \sigma'_p$) در نانولوله کربنی زیگزاگ ($5,0$) با استفاده از تغلیظ پتاسیم و بدون

۱. Intra Magnetizability

۲. Bonding Magnetizability

۳. Total Magnetizability

جدول ۳. بارهای اتمی مولیکن، NBO و QTAIM پوشیدگی‌های دیامغناطیسی (σ_d)، پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال نیافته (σ_p)، پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال یافته (σ_p)، پوشیدگی پارامغناطیسی کل ($\sigma_p + \sigma'_p$) و پوشیدگی همسانگرد شیمیایی (σ_{iso}) ^{13}C در نانولوله‌های کربنی زیگزاگ ($5,0$) با اثر تغلیظ پتاسیم.

Atom	Charge Mulliken	Charge NBO	Charge QTAIM	σ_d	σ_p	σ'_p	$\sigma_p + \sigma'_p$	σ_{iso}
C ₁	-۰,۰۴۸۵۵۳	-۰,۲۲۱۴	-۰,۰۶۰۴	۲۵۶,۳۸	۲۲,۱۲	-۲۳۸,۵۲	-۲۱۶,۴	۳۵,۷۰
C _۲	-۰,۱۸۵۲۶۵	-۰,۱۰۰۰	-۰,۲۲۲۹	۲۵۶,۸۵	۱۴,۳۰	-۲۳۸,۵۲	-۲۲۴,۲۲	-۹۳,۴۶
C _۳	-۰,۰۴۸۵۵۲	-۰,۲۲۱۴	-۰,۰۶۰۳	۲۵۶,۳۸	۲۲,۱۲	-۲۳۸,۵۲	-۲۱۶,۴	۳۵,۶۹
C _۴	-۰,۱۸۵۲۶۳	-۰,۱۰۰۰	-۰,۲۲۲۹	۲۵۶,۸۵	۱۴,۳۰	-۳۶۳,۶۸	-۳۴۹,۳۸	-۹۳,۴۶
C _۵	-۰,۰۱۰۶۶۰	-۰,۲۰۰۹	۰,۰۰۵۵	۲۵۷,۳۱	۲۳,۸۰	-۲۳۰,۴۲	-۲۰۶,۶۲	۴۷,۶۵
C _۶	-۰,۰۵۰۱۱۸	۰,۱۲۰۸	-۰,۰۸۳۶	۲۵۶,۹۸	۱۹,۷۱	-۴۱۵,۱۶	-۳۹۵,۴۵	-۱۳۶,۳۹
C _۷	-۰,۰۱۰۶۶۰	-۰,۲۰۰۹	۰,۰۰۵۵	۲۵۷,۳۱	۲۳,۸۰	-۲۳۰,۴۲	-۲۰۶,۶۲	۴۷,۶۵
C _۸	-۰,۰۵۰۱۱۸	۰,۱۲۰۸	-۰,۰۸۳۶	۲۵۶,۹۸	۱۹,۷۱	-۴۱۵,۱۶	-۳۹۵,۴۵	-۱۳۶,۳۹
C _۹	-۰,۰۴۷۷۶۲	-۰,۲۲۱۳	-۰,۰۵۹۵	۲۵۶,۳۸	۲۲,۰۷	-۲۳۷,۹۲	-۲۱۵,۸۵	۳۶,۲۰
C _{۱۰}	-۰,۰۴۹۳۸۲	۰,۱۲۱۳	-۰,۰۸۳۷	۲۵۶,۹۹	۱۹,۶۹	-۴۱۵,۶۶	-۳۹۵,۹۷	-۱۳۶,۸۲
C _{۱۱}	-۰,۰۴۷۷۵۷	-۰,۲۲۱۳	-۰,۰۵۹۵	۲۵۶,۳۸	۲۲,۰۷	-۲۳۷,۹۲	-۲۱۵,۸۵	۳۶,۲۰
C _{۱۲}	-۰,۰۴۹۳۸۲	۰,۱۲۱۳	-۰,۰۸۳۷	۲۵۶,۹۹	۱۹,۶۹	-۴۱۵,۶۷	-۳۹۵,۹۸	-۱۳۶,۸۲
C _{۱۳}	-۰,۰۲۶۰۲۸	-۰,۲۰۸۸	-۰,۰۳۶۶	۲۵۶,۵۸	۲۰,۵۰	-۲۲۹,۰۸	-۲۰۸,۵۸	۴۳,۹۵
C _{۱۴}	-۰,۱۸۶۲۰۶	-۰,۱۰۱۴	-۰,۲۲۳۵	۲۵۶,۸۵	۱۴,۲۹	-۳۶۲,۷۶	-۳۴۸,۴۷	-۹۲,۶۴
C _{۱۵}	-۰,۰۲۶۰۲۶	-۰,۲۰۸۸	-۰,۰۳۶۶	۲۵۶,۵۸	۲۰,۵۰	-۲۲۹,۰۸	-۲۰۸,۵۸	۴۳,۹۵
C _{۱۶}	-۰,۱۸۶۱۹۷	-۰,۱۰۱۴	-۰,۲۲۳۵	۲۵۶,۸۵	۱۴,۲۹	-۳۶۲,۷۷	-۳۴۸,۴۸	-۹۲,۶۵
C _{۱۷}	-۰,۰۲۵۴۲۱	-۰,۲۰۹۵	-۰,۰۳۶۰	۲۵۶,۵۶	۲۰,۳۵	-۲۲۷,۹۴	-۲۰۷,۵۹	۴۴,۹۲
C _{۱۸}	-۰,۰۴۵۶۲۷	۰,۱۱۷۹	-۰,۰۹۵۸	۲۵۷,۰۱	۱۸,۶۰	-۴۳۱,۶۳	-۴۱۳,۰۳	-۱۴۸,۳۵
C _{۱۹}	-۰,۰۲۵۴۲۲	-۰,۲۰۹۵	-۰,۰۳۶۰	۲۵۶,۵۶	۲۰,۳۵	-۲۲۷,۹۴	-۲۰۷,۵۹	۴۴,۹۲
C _{۲۰}	-۰,۰۴۵۶۲۷	۰,۱۱۷۹	-۰,۰۹۵۸	۲۵۷,۰۱	۱۸,۶۰	-۴۳۱,۶۴	-۴۱۳,۰۴	-۱۴۸,۳۶
K _{۲۱}	۰,۶۷۵۴۸۷	۰,۹۰۳۵	۰,۸۹۹۹	۱۳۲۶,۹۱	۱,۹۶	-۲۸,۲۱	-۲۶,۲۵	۱۳۱۲,۹۱
K _{۲۲}	۰,۶۷۴۵۳۸	۰,۹۰۳۳	۰,۸۹۹۴	۱۳۲۶,۹۱	۱,۹۶	-۲۸,۳۹	-۲۶,۴۳	۱۳۱۲,۷۶

نانولوله کربنی زیگزاگ ($5,0$) با تغلیظ پتاسیم، با گاف انرژی ۶ کیلو کالری بر مول، به میزان ۱/۸ کیلو کالری بر مول، گاف انرژی کمتری در مقایسه با نانولوله کربنی زیگزاگ ($5,0$) بدون پتاسیم، دارد. این موضوع پایداری بیشتری را به واسطه اثر تغلیظ پتاسیم بر نانولوله ($5,0$) نشان می‌دهد. یکی از روش‌های تبدیل یک نانولوله کربنی نوع P به نوع N، تغلیظ هترواتم بر روی آن است. در این تحقیق نانولوله کربنی با یک الکترون دهنده مانند پتاسیم تغلیظ شده است.

محاسباتی PBE/PBE/6-31G(d) در برابر مغناطیس‌پذیری همسانگرد درون اتمی ($\chi(\Omega)^{intra}$)، بین اتمی ($\chi(C|\Omega)$) و کل اتمی ($\chi(\Omega)$) بر حسب cgs-ppm در شکل‌های ۷ و ۸ داده شده است.

در جدول ۱ مشاهده می‌شود که نانولوله کربنی زیگزاگ ($5,0$) گاف انرژی ۸/۷ (ΔE) کیلو کالری بر مول است. نوار شکاف بزرگ با فاصله زیاد LUMO-HOMO، اغلب به عنوان یک وضعیت پایداری مولکول در نظر گرفته می‌شود [۱۹].

جدول ۴. مغناطیس‌پذیری همسانگرد درون اتمی ($\chi(\Omega)^{intra}$)، مغناطیس‌پذیری همسانگرد بین اتمی ($\chi(C|\Omega)$) و مغناطیس‌پذیری همسانگرد کل اتمی ($\chi(\Omega)$) برای نانولوله کربنی تک دیواره زیگزاگ (۵,۰) بدون تغلیظ پتاسیم و با تغلیظ پتاسیم.

PBEPBE/6-31G(d) without potassium			PBEPBE/6-31G(d) with potassium			Atom
$\chi(\Omega)$	$\chi(C \Omega)$	$\chi(\Omega)^{intra}$	$\chi(\Omega)$	$\chi(C \Omega)$	$\chi(\Omega)^{intra}$	
-۴,۲۸۰۴	-۳,۷۹۰۲	-۰,۴۹۰۲	-۱۰,۴۴۶۵	-۹,۱۵۲۵	-۱,۲۹۴۰	C _۱
۲,۵۲۸۱	-۲,۵۸۴۷	۵,۱۱۲۸	-۶,۹۰۶۲	-۷,۶۳۹۲	۰,۷۳۳۰	C _۲
-۴,۲۸۰۴	-۳,۷۹۰۲	-۰,۴۹۰۲	-۱۰,۴۴۲۶	-۹,۱۴۸۶	-۱,۲۹۴۰	C _۳
۲,۵۲۸۱	-۲,۵۸۴۹	۵,۱۱۳۰	-۶,۹۰۲۳	-۷,۶۳۵۳	۰,۷۳۳۱	C _۴
-۴,۷۱۲۹	-۴,۱۲۵۳	-۰,۵۸۷۶	-۱۰,۹۱۴۲	-۹,۴۵۱۳	-۱,۴۶۲۸	C _۵
۱,۲۲۲۰	-۲,۸۵۱۲	۴,۰۷۳۳	-۴,۹۵۸۵	-۶,۹۷۶۲	۲,۰۱۷۷	C _۶
-۴,۷۱۲۷	-۴,۱۲۵۱	-۰,۵۸۷۶	-۱۰,۹۱۵۰	-۹,۴۵۲۱	-۱,۴۶۲۸	C _۷
۱,۲۲۱۸	-۲,۸۵۱۳	۴,۰۷۳۱	-۴,۹۵۶۹	-۶,۹۷۴۶	۲,۰۱۷۷	C _۸
-۴,۲۹۸۱	-۳,۸۰۵۹	-۰,۴۹۲۲	-۱۰,۴۳۸۶	-۹,۱۴۲۳	-۱,۲۹۶۳	C _۹
۱,۰۹۹۱	-۲,۸۹۴۴	۳,۹۹۳۶	-۴,۹۴۹۴	-۶,۹۷۷۰	۲,۰۲۷۶	C _{۱۰}
-۴,۲۹۷۹	-۳,۸۰۵۷	-۰,۴۹۲۲	-۱۰,۴۴۱۴	-۹,۱۴۵۲	-۱,۲۹۶۳	C _{۱۱}
۱,۰۹۹۲	-۲,۸۹۴۲	۳,۹۹۳۵	-۴,۹۵۰۷	-۶,۹۷۸۳	۲,۰۲۷۷	C _{۱۲}
-۴,۵۲۵۴	-۳,۹۸۱۷	-۰,۵۴۳۶	-۱۰,۳۶۱۸	-۸,۹۶۳۴	-۱,۳۹۸۵	C _{۱۳}
۲,۶۱۰۲	-۲,۵۵۵۲	۵,۱۶۵۴	-۶,۹۲۳۴	-۷,۶۳۴۲	۰,۷۱۰۸	C _{۱۴}
-۴,۵۲۵۴	-۳,۹۸۱۸	-۰,۵۴۳۶	-۱۰,۳۶۲۰	-۸,۹۶۳۵	-۱,۳۹۸۵	C _{۱۵}
۲,۶۱۰۴	-۲,۵۵۵۱	۵,۱۶۵۵	-۶,۹۲۵۷	-۷,۶۳۶۷	۰,۷۱۱۰	C _{۱۶}
-۴,۵۶۳۲	۴,۰۱۱۵	-۰,۵۵۱۶	-۱۰,۳۵۸۲	-۸,۹۵۲۷	-۱,۴۰۵۶	C _{۱۷}
۰,۷۱۵۶	-۳,۰۷۷۹	۳,۷۹۳۵	-۴,۸۵۵۴	-۷,۰۳۶۵	۲,۱۸۱۲	C _{۱۸}
-۴,۵۶۳۴	-۴,۰۱۱۷	-۰,۵۵۱۷	-۱۰,۳۵۷۶	-۸,۹۵۲۰	-۱,۴۰۵۶	C _{۱۹}
۰,۷۱۵۵	۳,۷۹۳۵	۳,۷۹۳۵	-۴,۸۵۵۴	-۷,۰۳۶۶	۲,۱۸۱۲	C _{۲۰}
			-۱۷,۵۹۴۲	-۲,۵۴۴۹	-۱۵,۰۴۹۳	K _{۲۱}
			-۱۷,۵۹۱۳	-۲,۵۴۷۹	-۱۵,۰۴۳۴	K _{۲۲}

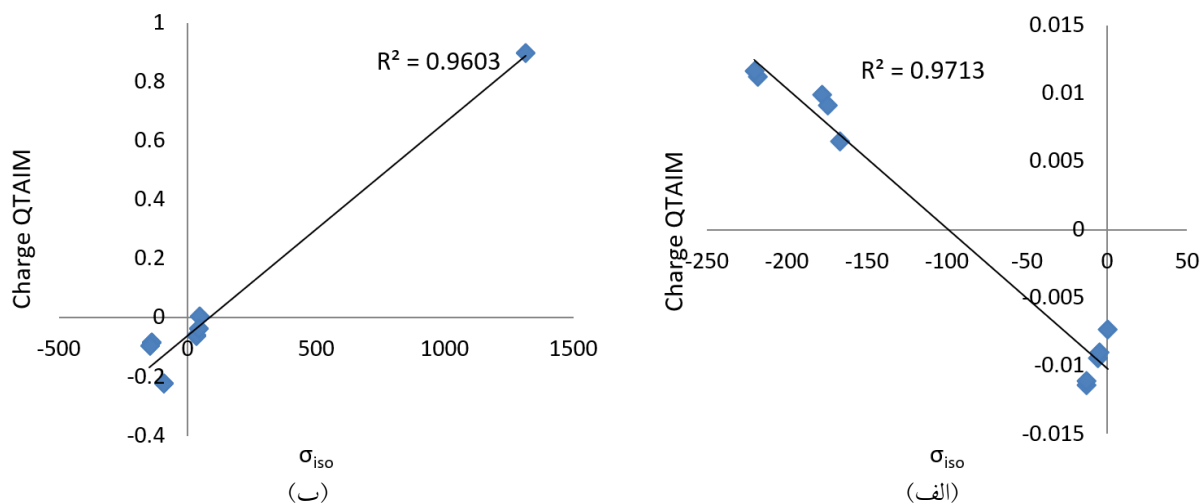
الکترون‌های اضافه شده، سطح انرژی فرمی را به طرف باند هدایت جابه‌جا کرده و لذا گاف انرژی و قدرت سد انرژی را کاهش می‌دهند. از این رو الکترون‌ها به راحتی از میان سد تونل زده و نانولوله به صورت نوع N عمل می‌کند.

نمودار بار اتمی QTAIM بر حسب پوشیدگی‌های شیمیایی در شکل‌های ۴ تا ۶ و نمودار بارهای اتمی مولیکن و NBO بر حسب پوشیدگی‌های شیمیایی در شکل‌های S1-S1۲ در اطلاعات پیوست آمده است.

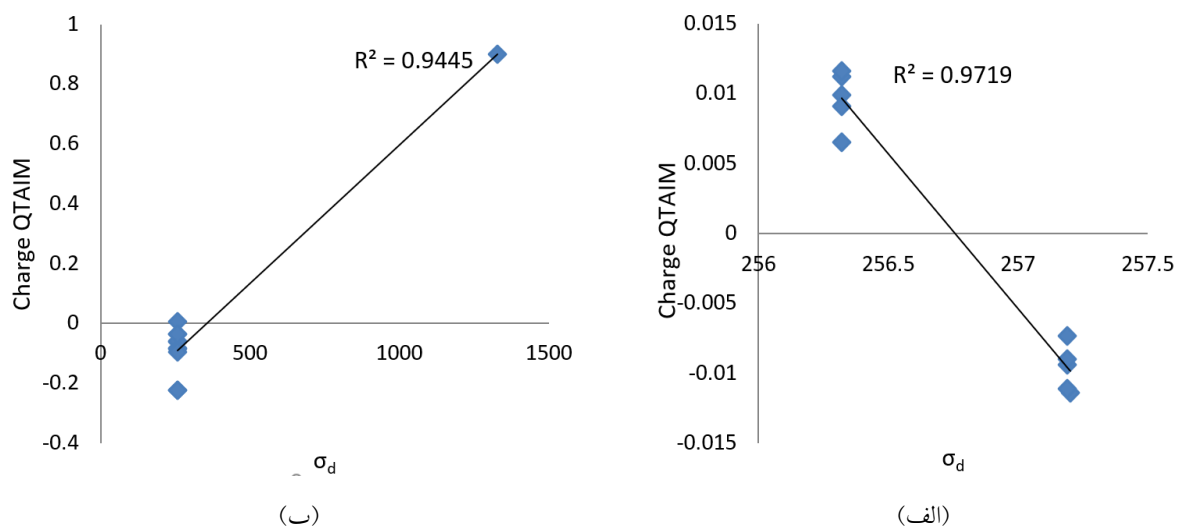
۱.۳. ارتباط بار اتمی مولیکن با پوشیدگی‌های مغناطیسی

۱.۱.۳. در نانولوله کربنی (۵,۰) با شرط مرزی دوره‌ای بدون تغلیظ پتاسیم

ارتباط خطی قوی بین بار اتمی مولیکن با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی ($\sigma_{iso}^{13}C$) با ضریب رگرسیون نزدیک به یک ($R^2=0,9698$) شکل S1 و ارتباط کاملاً خطی با پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d) شکل S5، با ضریب رگرسیون ۱ مشاهده می‌شود. ارتباط نسبتاً خطی بین پوشیدگی پارامغناطیسی کل



شکل ۴. نمودار رابطه بین بار اتمی QTAIM با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی σ_{iso} در نانولوله زیگزاگ (۵,۰) (الف) بدون اثر تغلیظ پتاسیم و (ب) با اثر تغلیظ پتاسیم.



شکل ۵. نمودار رابطه بین بارهای اتمی QTAIM و پوشیدگی دیامغناطیسی σ_d در نانولوله زیگزاگ (۵,۰) (الف) بدون اثر تغلیظ پتاسیم و (ب) با اثر تغلیظ پتاسیم.

^{13}C (σ_{iso}) شکل S۲ با $R^2=0.9377$ ، و با پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d) شکل S۶ با $R^2=0.9461$ ارتباط خطی وجود دارد. بین بار اتمی مولیکن و پوشیدگی پارامغناطیسی ($\sigma_p + \sigma_p$) شکل S۱۰ با $R^2=0.4939$ ارتباطی وجود ندارد.

۲.۳. ارتباط بار اتمی NBO با پوشیدگی های مغناطیسی

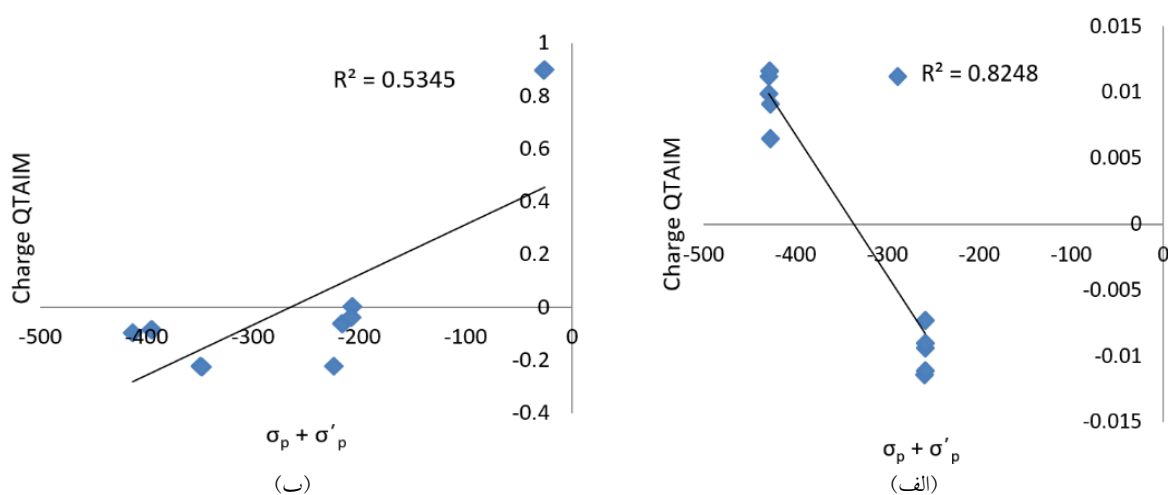
۲.۳.۱. در نانولوله کربنی (۵,۰) با شرط مرزی دوره‌ای بدون تغلیظ پتاسیم

بررسی بار اتمی NBO برای نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) با

($\sigma_p + \sigma_p$) با بار اتمی مولیکن با $R^2=0.8736$ ، شکل S۹، وجود دارد.

۲.۱.۳. در نانولوله کربنی (۵,۰) با شرط مرزی دوره‌ای با تغلیظ پتاسیم

مطالعه بار اتمی مولیکن برای نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) با استفاده از تغلیظ پتاسیم با شرط مرزی دوره‌ای نشان می‌دهد که در این نانولوله بین بار اتمی مولیکن با پوشیدگی همسانگرد



شکل ۶. نمودار رابطه بین بارهای اتمی QTAIM و پوشیدگی پارامغناطیسی ($\sigma_p + \sigma'_p$) در نانولوله زیگزاگ (۵,۰) (الف) بدون اثر تغلیظ پتاسیم و (ب) با اثر تغلیظ پتاسیم.

۳.۳. ارتباط بار اتمی QTAIM با پوشیدگی های مغناطیسی

۱.۳.۳. در نانولوله کربنی (۵,۰) با شرط مرزی دوره‌ای بدون تغلیظ پتاسیم

بررسی بار اتمی QTAIM برای نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) با شرط مرزی دوره‌ای نشان می‌دهد که با افزایش پوشیدگی شیمیایی، بار اتمی QTAIM به مقادیر منفی‌تر تغییر می‌یابد. در این نانولوله ارتباط خطی قوی بین بار اتمی QTAIM با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی ^{13}C (σ_{iso}) شکل ۴. الف با $R^2 = 0.9713$ و با پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d) شکل ۵. الف با $R^2 = 1$ مشاهده شد. ارتباط بین بار اتمی QTAIM با پوشیدگی پارامغناطیسی کل ($\sigma_p + \sigma'_p$) شکل ۶. الف با $R^2 = 0.8248$ ، نسبتاً خطی است.

۲.۳.۳. در نانولوله کربنی (۵,۰) با شرط مرزی دوره‌ای با تغلیظ

پتاسیم

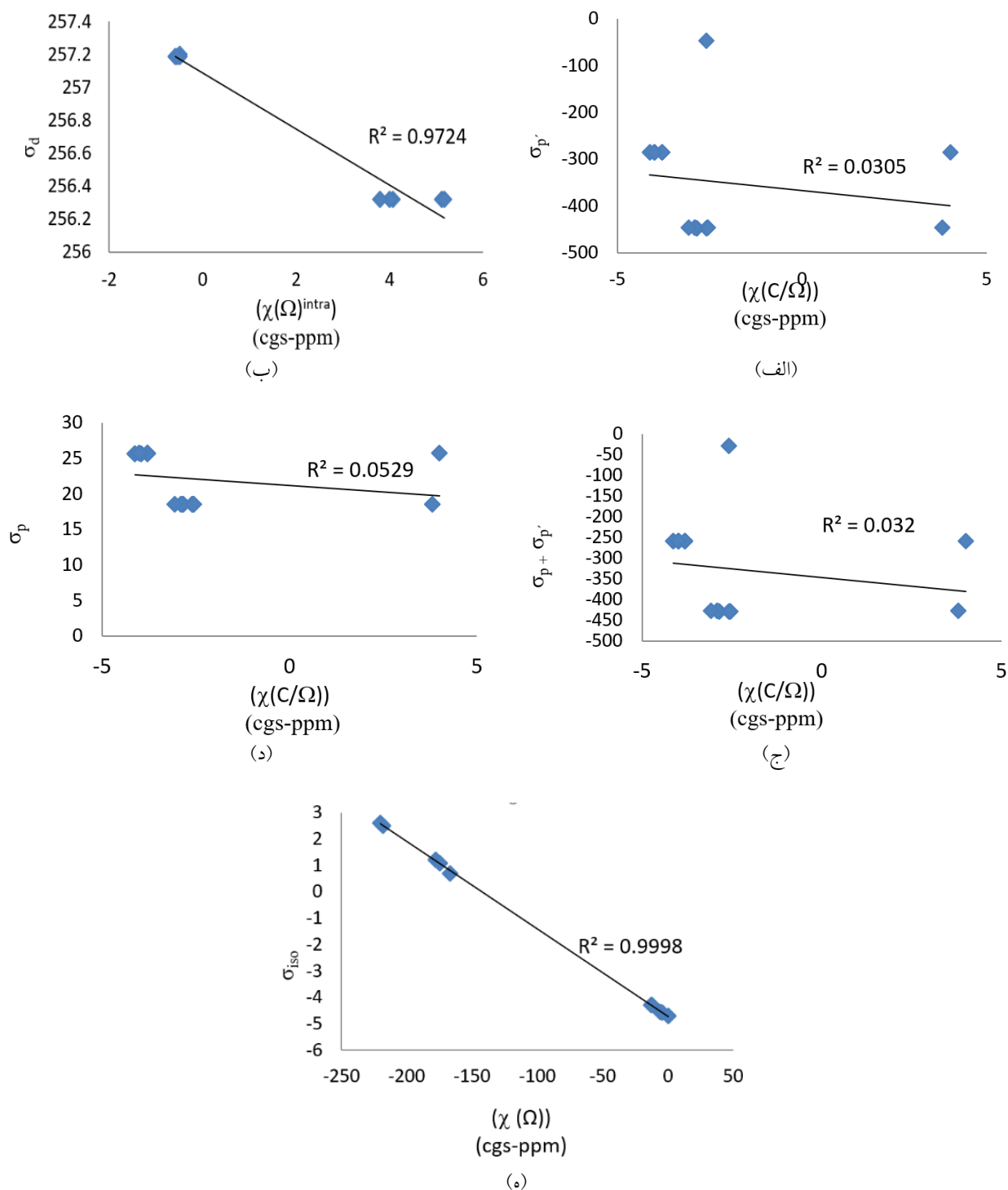
مطالعه بار اتمی QTAIM برای نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) با استفاده از تغلیظ پتاسیم با شرط مرزی دوره‌ای نشان می‌دهد که در این نانولوله، رابطه‌ای بین بار اتمی QTAIM با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی ^{13}C (σ_{iso}) شکل ۴. ب با $R^2 = 0.9303$ و با پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d) شکل ۵. ب

شرط مرزی دوره‌ای نشان می‌دهد که با افزایش پوشیدگی شیمیایی، بار اتمی NBO به مقادیر منفی‌تر تغییر می‌یابد. در این نانولوله ارتباط خطی بین بار اتمی NBO با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی ^{13}C (σ_{iso}) شکل S۳ با $R^2 = 0.9687$ و با پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d) شکل S۷، رابطه کاملاً خطی با ضریب رگرسیون $R^2 = 1$ مشاهده شد. ارتباط نسبتاً خطی بین پوشیدگی پارامغناطیسی کل ($\sigma_p + \sigma'_p$) شکل S۱۱ با بار اتمی NBO ($R^2 = 0.8736$) برقرار می‌شود.

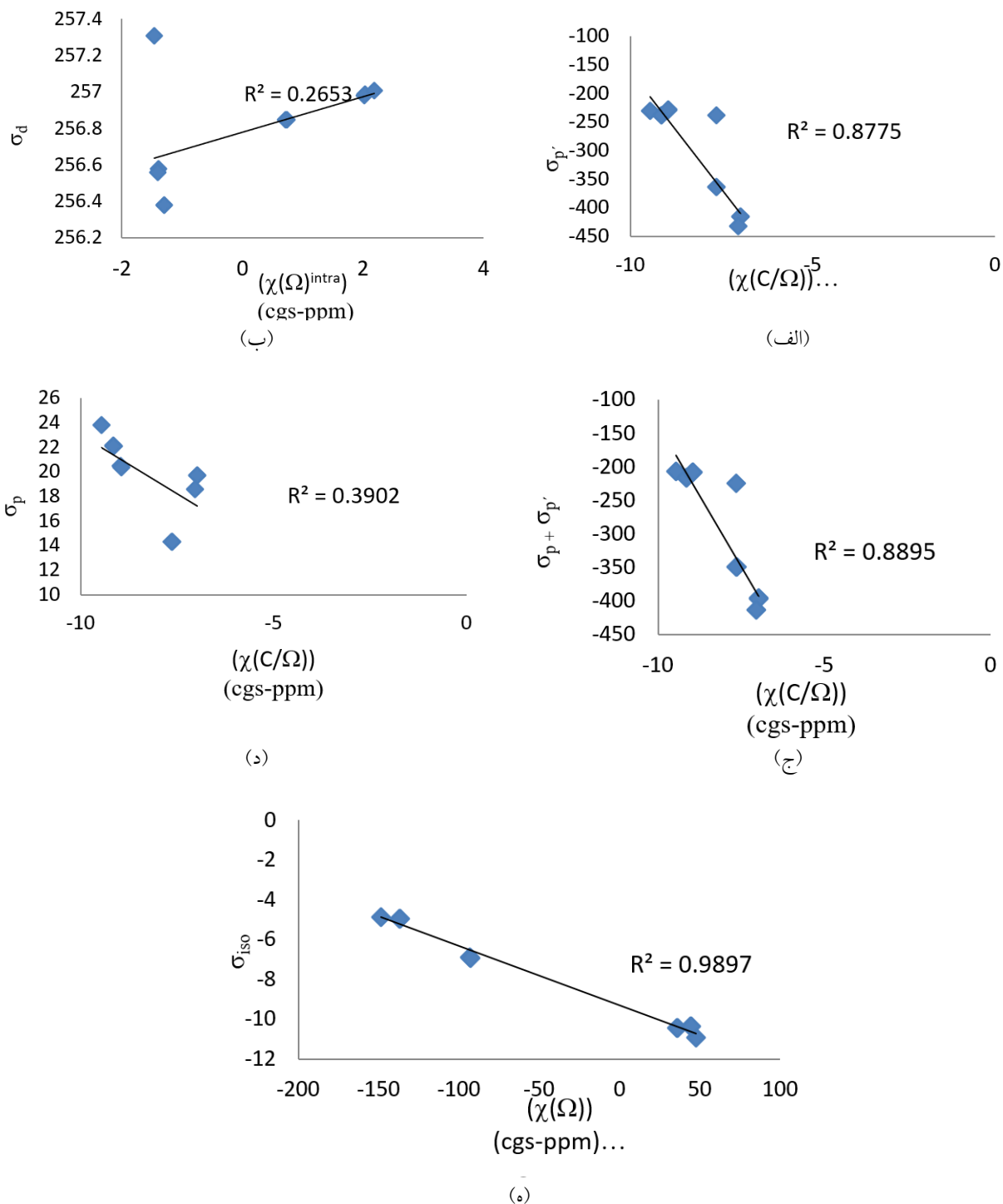
۲.۲.۳. در نانولوله کربنی (۵,۰) با شرط مرزی دوره‌ای با

تغلیظ پتاسیم

مطالعه بار اتمی NBO برای نانولوله کربنی زیگزاگ (۵,۰) با استفاده از تغلیظ پتاسیم با شرط مرزی دوره‌ای نشان می‌دهد که در این نانولوله، رابطه‌ای بین بار اتمی NBO با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی ^{13}C (σ_{iso}) شکل S۴، و با پوشیدگی پارامغناطیسی کل ($\sigma_p + \sigma'_p$) شکل S۱۲ وجود ندارد. ارتباط بین بار اتمی NBO با پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d) شکل S۸ ($R^2 = 0.8125$)، نسبتاً خطی است.



شکل ۷. (الف) نمودار پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال یافته (σ_p) در برابر مغناطیس‌پذیری بین‌اتمی ($\chi(C/\Omega)$)، (ب) نمودار پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d) در برابر مغناطیس‌پذیری درون‌اتمی ($\chi(\Omega)^{intra}$)، (ج) نمودار پوشیدگی پارامغناطیسی ($\sigma_p + \sigma_p'$) در برابر مغناطیس‌پذیری بین‌اتمی ($\chi(C/\Omega)$)، (د) نمودار پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال نیافته (σ_p) در برابر مغناطیس‌پذیری بین‌اتمی ($\chi(C/\Omega)$) و (ه) نمودار پوشیدگی همسانگرد (σ_{iso}) در برابر مغناطیس‌پذیری همسانگرد کل‌اتمی ($\chi(\Omega)$) در سطح محاسباتی PBE/6-31G(d) بدون استفاده از تغلیظ پتاسیم.



شکل ۸. (الف) نمودار پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال یافته (σ_p) در برابر مغناطیس‌پذیری بین اتمی $(\chi(C/\Omega))$ ، (ب) نمودار پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_d) در برابر مغناطیس‌پذیری درون اتمی $(\chi(\Omega)^{intra})$ ، (ج) نمودار پوشیدگی پارامغناطیسی $(\sigma_p + \sigma_p')$ در برابر مغناطیس‌پذیری بین اتمی $(\chi(C/\Omega))$ ، (د) نمودار پوشیدگی همسانگرد (σ_{iso}) در برابر مغناطیس‌پذیری همسانگرد کل اتمی $(\chi(\Omega))$ در سطح محاسباتی PBEPBE/6-31G(d) با تغلیظ پتاسیم.

با $R^2 = 0.9445$ دیده می‌شود. ولی با پوشیدگی پارامغناطیسی کل $(\sigma_p + \sigma_p')$ شکل ۶. ب ارتباطی وجود ندارد.

اتمی فراهم می‌کند. در نتیجه یک رابطه خطی بین پوشیدگی همسانگرد و مغناطیس‌پذیری کل اتمی در نانولوله‌های کربنی مورد مطالعه وجود دارد. در تمامی مدل‌ها افزایش پوشیدگی شیمیایی ^{13}C در اتم‌های کربن نانولوله‌های کربنی نیمه هادی با کاهش مغناطیس‌پذیری کل اتمی همخوانی دارد. مطالعه مغناطیس‌پذیری کل اتمی برای نانولوله‌های کربنی زیگزاگ $(5,0)$ و بدون تغلیظ پتاسیم با شرط مرزی دوره‌ای نشان می‌دهد که ارتباط خطی و مناسبی بین مغناطیس‌پذیری کل اتمی با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی ^{13}C وجود دارد، به طوری که با افزایش پوشیدگی شیمیایی مغناطیس‌پذیری کاهش می‌یابد. لازم به ذکر است که در محاسبات انجام گرفته در پژوهش‌های قبلی، از روش شرایط مرزی دوره‌ای PBC استفاده نشده است. لذا طول نانولوله‌های مورد مطالعه در این پژوهش‌ها محدود انتخاب شده‌اند. با توجه به مطالعات قبلی و پژوهش‌های حاصل از این تحقیق در نهایت می‌توان به یک نتیجه‌گیری کلی رسید که بین بار اتمی و پوشیدگی ارتباط مشخصی وجود ندارد؛ به طوری که ممکن است ارتباط خطی داشته باشند یا نداشته باشند. ولی در نهایت بین مغناطیس‌پذیری کل اتمی χ (Ω) با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی ^{13}C (σ_{iso}) ارتباطی قوی و خطی وجود دارد.

۴. نتیجه‌گیری

نتایج حاصل از محاسبات NMR بر روی نانولوله کربنی زیگزاگ $(5,0)$ با تغلیظ پتاسیم و بدون تغلیظ پتاسیم، در سطح محاسباتی BEPBE/6-31G(d)، نشان می‌دهد که نانولوله کربنی زیگزاگ $(5,0)$ در اثر تغلیظ با پتاسیم، علاوه بر افزایش پایداری، به نانولوله کربنی نوع N تبدیل می‌شود. بین پوشیدگی دیامغناطیسی و پوشیدگی شیمیایی ^{13}C (σ_{iso}) با بارهای اتمی NBO، مولیکن، QTAIM (به استثنای ارتباط پوشیدگی شیمیایی ^{13}C (σ_{iso}) با بار اتمی NBO با اثر تغلیظ پتاسیم) در نانولوله کربنی تک جداره زیگزاگ $(5,0)$ تحت شرط مرزی دوره‌ای با پتاسیم و بدون پتاسیم ارتباط خطی وجود دارد. پوشیدگی پارامغناطیسی کل $(\sigma_{\text{p}} + \sigma_{\text{p}})$ با بارهای اتمی مولیکن،

۴.۳. ارتباط پوشیدگی‌های شیمیایی با مغناطیس‌پذیری‌ها

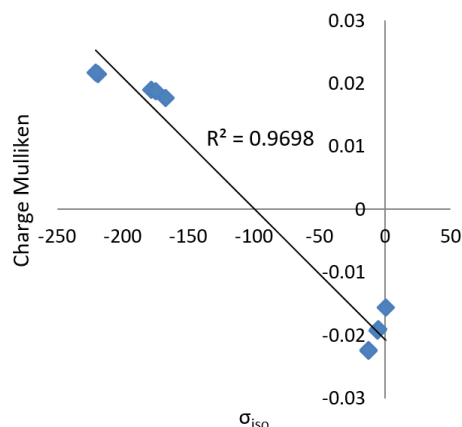
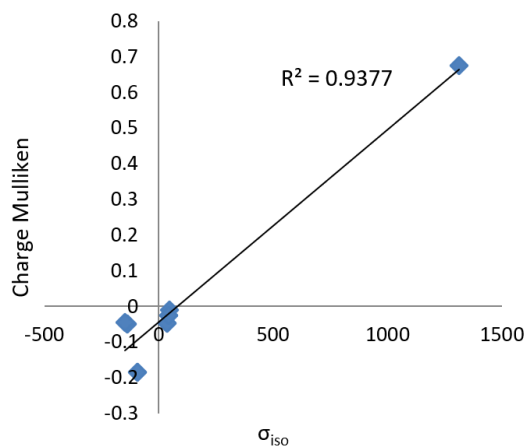
نمودارهای پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_{d})، پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال نیافته (σ_{p})، پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال یافته (σ_{p})، پوشیدگی پارامغناطیسی $(\sigma_{\text{p}} + \sigma_{\text{p}})$ و پوشیدگی همسانگرد (σ_{iso}) ^{13}C در نانولوله کربنی زیگزاگ $(5,0)$ با استفاده از تغلیظ پتاسیم و بدون استفاده از آن با شرط مرزی دوره‌ای (با استفاده از تقریب GIAO و در سطح محاسباتی BEPBE/6-31G(d) در برابر مغناطیس‌پذیری همسانگرد درون اتمی (χ (Ω)^{intra}))، بین اتمی (χ (Ω)) و کل اتمی (χ (Ω)) (cgs-ppm) در شکل‌های ۷ و ۸ ارائه شده است. برای نانولوله کربنی زیگزاگ $(5,0)$ با شرط مرزی دوره‌ای، ارتباط قوی بین مغناطیس‌پذیری همسانگرد کل اتمی (χ (Ω)) با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی ^{13}C (σ_{iso}) شکل ۷. ه و مغناطیس‌پذیری همسانگرد درون اتمی (χ (Ω)^{intra}) با پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_{d}) شکل ۷. ب با ضریب رگرسیون نزدیک به ۱ رابطه خطی خوب و مناسبی مشاهده شد ولی ارتباط خطی مناسبی بین مغناطیس‌پذیری همسانگرد بین اتمی (χ (Ω)) با پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال نیافته (σ_{p}) شکل ۷. د، پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال یافته (σ_{p}) شکل ۷. الف و پوشیدگی پارامغناطیسی کل $(\sigma_{\text{p}} + \sigma_{\text{p}})$ شکل ۷. ج وجود ندارد. در این نانولوله با استفاده از تغلیظ پتاسیم، بین مغناطیس‌پذیری همسانگرد کل اتمی (χ (Ω)) و پوشیدگی همسانگرد شیمیایی ^{13}C (σ_{iso}) شکل ۸. ه رابطه خطی با ضریب رگرسیون بیشتر از ۰/۹ وجود دارد. نیز ارتباط نسبتاً مناسبی بین پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال یافته (σ_{p}) شکل ۸. الف و پوشیدگی پارامغناطیسی کل $(\sigma_{\text{p}} + \sigma_{\text{p}})$ شکل ۸. ج با مغناطیس‌پذیری همسانگرد بین اتمی (χ (Ω)) دیده می‌شود ولی ارتباط خطی مناسبی بین مغناطیس‌پذیری همسانگرد درون اتمی (χ (Ω)^{intra}) با پوشیدگی دیامغناطیسی (σ_{d}) شکل ۸. ب و مغناطیس‌پذیری همسانگرد بین اتمی (χ (Ω)) با پوشیدگی پارامغناطیسی اختلال نیافته (σ_{p}) شکل ۸. د مشاهده نشد.

مغناطیس‌پذیری اتمی دید کلی نسبت به جمع چگالی جریان الکترونی درون حوزه اتمی و همچنین حوزه‌های مجاور بین

شیمیایی (σ_{iso}) ^{13}C ارتباط کاملاً خطی در هر دو ساختار بدون پتاسیم و با پتاسیم دارد. در نتیجه بار اتمی برای تفسیر پوشیدگی شیمیایی به اندازه مغناطیس پذیری قابل کاربرد نیست.

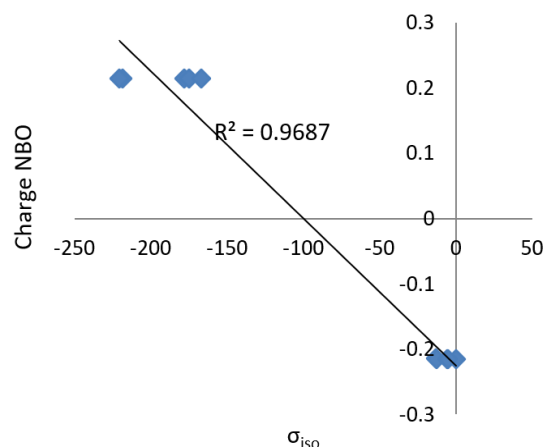
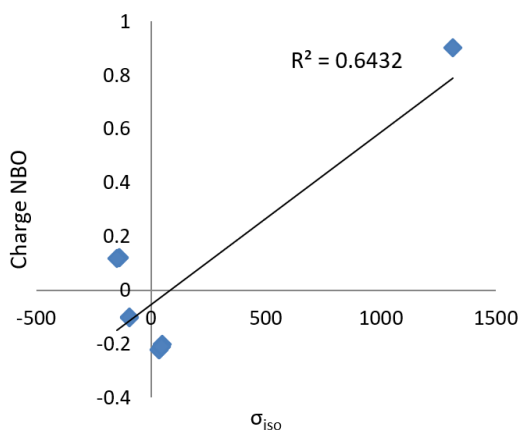
NBO و QTAIM در نانولوله بدون پتاسیم رابطه نسبتاً خطی دارد و در ساختارهای با تغلیظ پتاسیم، ارتباط خطی ندارند. از ارتباط بین مغناطیس پذیری‌ها و پوشیدگی‌های شیمیایی، فقط مغناطیس پذیری کل اتمی (Ω) با پوشیدگی همسانگرد

پیوست



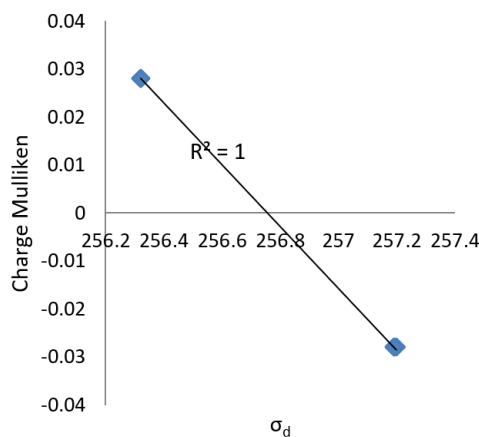
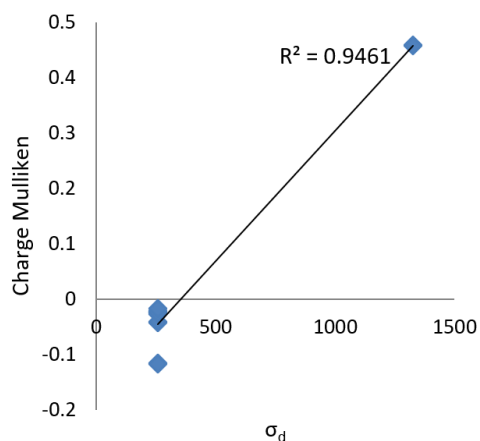
شکل S۲. نمودار رابطه بین بار اتمی مولیکن با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی σ_{iso} در نانولوله زیگزاگ ($5,0$) با اثر تغلیظ پتاسیم.

شکل S۱. نمودار رابطه بین بار اتمی مولیکن با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی σ_{iso} در نانولوله زیگزاگ ($5,0$) بدون اثر تغلیظ پتاسیم.



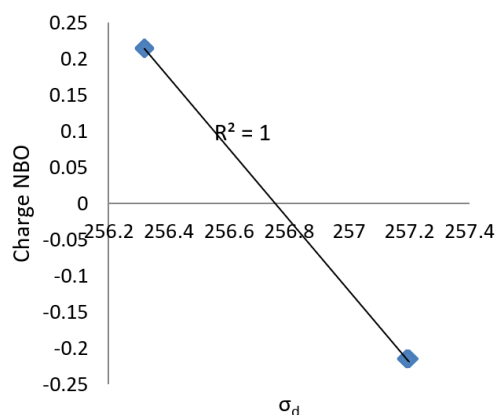
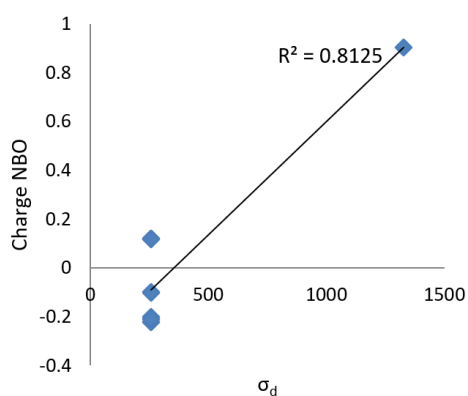
شکل S۴. نمودار رابطه بین بار اتمی NBO با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی σ_{iso} در نانولوله زیگزاگ ($5,0$) با اثر تغلیظ پتاسیم.

شکل S۳. نمودار رابطه بین بار اتمی NBO با پوشیدگی همسانگرد شیمیایی σ_{iso} در نانولوله زیگزاگ ($5,0$) بدون اثر تغلیظ پتاسیم.



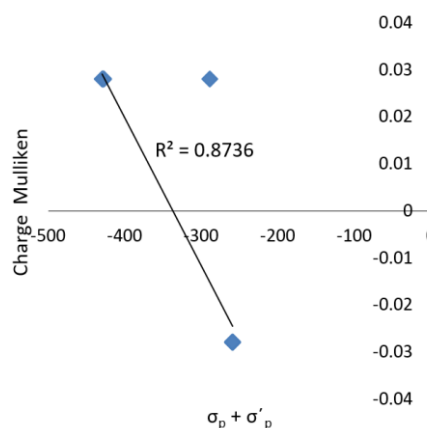
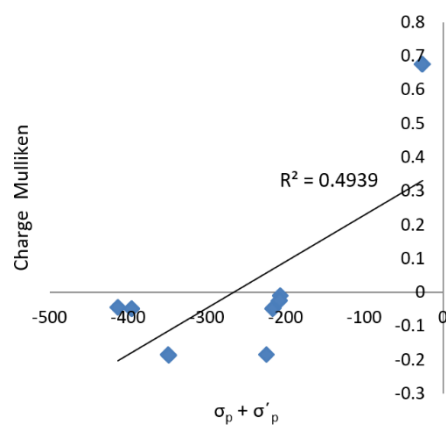
شکل ۵۶. نمودار رابطه بین بار اتمی مولیکن با پوشیدگی دیامغناطیسی σ_d در نانولوله زیگزاگ $(\Delta, 0)$ با اثر تغلیظ پتاسیم.

شکل ۵۵. نمودار رابطه بین بار اتمی مولیکن با پوشیدگی دیامغناطیسی σ_d در نانولوله زیگزاگ $(\Delta, 0)$ بدون اثر تغلیظ پتاسیم.



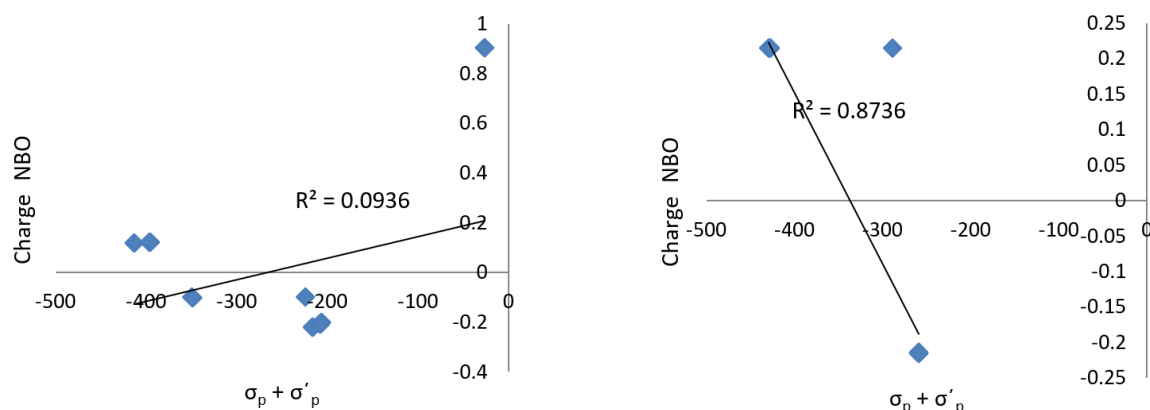
شکل ۵۸. نمودار رابطه بین بار اتمی NBO با پوشیدگی دیامغناطیسی σ_d در نانولوله زیگزاگ $(\Delta, 0)$ با اثر تغلیظ پتاسیم.

شکل ۵۷. نمودار رابطه بین بار اتمی NBO با پوشیدگی دیامغناطیسی σ_d در نانولوله زیگزاگ $(\Delta, 0)$ بدون اثر تغلیظ پتاسیم.



شکل ۵۱۰. نمودار رابطه بین بار اتمی مولیکن با پوشیدگی پارامغناطیسی $(\sigma_p + \sigma'_p)$ در نانولوله زیگزاگ $(\Delta, 0)$ با اثر تغلیظ پتاسیم.

شکل ۵۹. نمودار رابطه بین بار اتمی مولیکن با پوشیدگی پارامغناطیسی $(\sigma_p + \sigma'_p)$ در نانولوله زیگزاگ $(\Delta, 0)$ بدون اثر تغلیظ پتاسیم.



شکل ۱۱. نمودار رابطه بین بار اتمی NBO با پوشیدگی پارامغناطیسی $(\sigma_p + \sigma'_p)$ در نانولوله زیگزاگ $(5,0)$ بدون اثر تغلیظ پتاسیم.

شکل ۱۲. نمودار رابطه بین بار اتمی NBO با پوشیدگی پارامغناطیسی $(\sigma_p + \sigma'_p)$ در نانولوله زیگزاگ $(5,0)$ با اثر تغلیظ پتاسیم.

مراجع

1. R F W. Bader and T A Keith, *J. Chem. Phys.* **99** (1993) 3683.
2. T A Keith and R F W Bader, *Can. J. Chem.* **74** (1996) 185.
3. T A Keith and R F W Bader, *Chemical Physics Letters* 194 (1992) 1.
4. T A Keith and R F W Bader, *Chem. Phys. Lett.* **210** (1993) 223.
5. R Chauvin, C Lepetit, B Silvi, and E Alikhani, "Applications of Topological Methods in Molecular Chemistry (Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics)" Springer. 1st ed. Edition (2016)
6. R F W Bader and T A Keith, *Int. J. Quantum Chem.* **60**, 1 (1996) 373.
7. C Foroutan Nejad, *J. Phys. Chem. A* **115**, 45 (2011) 12555.
8. C Foroutan Nejad, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 27 (2012) 9738.
9. M Monajjemi, J Najafpour, F Mollaamin, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures.* **21**, 3 (2012) 213.
10. M Monajjemi and J Najafpour, *Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures*, **22**, (2014) 575.
11. J Najafpour, M Monajjemi, H Aghaie, and K Zare, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures* **23**, 3 (2014) 218.
12. J Najafpour, M Monajjemi, and H Aghaie, *J. Comput. Theor. Nanosci.* **11**, 9 (2013) 2005.
13. K Y Chun, S K Choi, H J Kang, C Y Park, and Ch J Lee, *Carbon* (2006) 1491.
14. M Salvato, M Lucci, I Ottaviani, M Cirillo, E Tamburri, I Cianchetta, V Guglielmotti, S Orlanducci, M L Terranova, and M Pasquali. *Phys. Rev. B* **84** (2011) 233406.
15. S Melchor and J A Dobado, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* **44** (2004) 1639.
16. M J Frisch, G W Trucks, and H B Schlegel, "Gaussian 09", Gaussian, Inc., Waillingford CT (2009).
17. F Biegler and D Bayles, *J. Comp. Chem.* **22**, 5 (2001) 545.
18. R F W Bader, *J. Phys. Chem. A* **111**, 32 (2007) 7966.
19. M Monajjemi, V S Lee, M Khaleghian, B Honarparvar, and F Mollaamin, *J. Phys. Chem. C* **114**, 36 (2010) 15315.