مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۵، شمارهٔ ۳، پاییز ۹۴

برهم کنش بین گاز F_2با حالت خالص و جایگزین شده 3C آرمیچر (۴و۴) نانو لولهٔ بورن فسفید: مطالعهٔ DFT

مهدی رضایی صامتی و عترت السادات دادفر

گروه شیمی فیزیک، دانشکدهٔ علوم پایه، دانشگاه ملایر

پست الکترونیکی: mrsameti@maleru.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۳/۸/۲۲ ؛ دریافت نسخهٔ 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 لولهٔ بورن فسفید با استفاده از نظریهٔ 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 محاسبهٔ پارامترهای کوانتومی وNQR 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 بر هم 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 ηQ اولین لایه بیشتر از سایر لایه‌ها است.

واژه‌های کلیدی: NQR، BPNTS ، جذب F_2، 3c-doped، DFT.

.

مقالهٔ کامل در بخش انگلیسی همین شمارهٔ مجله به چاپ رسیده است.