مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۰، شمارهٔ ۳، پاییز ۱۳۹۹
DOI: 10.47176/ijpr.20.3.20912

مطالعهٔ بنیادی برهم‌کنش گاز N_2O بر روی سطوح حالت‌های خالص و آلایش یافته با Si، Ga و SiGa نانولولهٔ آرمچیر بور فسفید: به روش DFT

مهدی رضایی صامتی و خاطره هادیان

گروه شیمی فیزیک، دانشکدهٔ علوم پایه، دانشگاه ملایر

پست الکترونیکی: mrsameti@maleru.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۱۲/۱۲ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۳۹۵/۰۵/۱۳)

چکیده

در این تحقیق با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی، پارامترهای الکتریکی، ساختاری، کوانتومی و تشدید مغناطیس هسته‌ای (NMR) مربوط به برهم‌کنش گاز N_2O بر روی موقعیت اتم‌های B و P حالت‌های خالص و آلایش یافته با Si، Ga و SiGa نانولولهٔ آرمچیر(۴ و ۴) بور فسفید (BPNTs) مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور هفت مدل جذبی را بر روی سطح خارجی نانولولهٔ بور فسفید در نظر گرفته و سپس تمام ساختارهای مورد مطالعه را با استفاده از روش B3LYP و توابع بنیادی 6-31G(d) بهینه کرده‌ایم . ساختارهای بهینه شده برای محاسبهٔ پارامترهای الکتریکی، ساختاری، کوانتومی و NMR مورد استفاده قرار گرفته‌اند. نتایج حاصل نشان می‌دهد که مقادیر انرژی‌های جذب تمام مدل‌های مورد مطالعه منفی بوده، گرماده و از نظر ترمودینامیکی مساعد هستند. هنگامی که گاز N_2O از سر اکسیژن خود جذب اتم بور نانولوله شود، این گاز به اکسیژن اتمی و نیتروژن مولکولی تفکیک می‌شود. در این حالت انرژی جذب بیشتر از سایر مدل‌ها بوده لذا از سایر مدل‌ها نیز پایدارتر است. در مدل‌های جذبی A ، B و C پارامتر سختی کروی نانولوله کاهش قابل توجهی را نسبت به حالت اولیه نشان می‌دهد که بیانگر افزایش واکنش‌پذیری و فعالیت نانولوله است. همچنین در این مدل‌ها مقدار الکترون‌خواهی، پتانسیل شیمیایی، الکترونگاتیویته و پارامتر نرمی افزایش قابل ملاحظه‌ای را نسبت به حالت اولیه نشان می‌دهند. نتایج حاصل از محاسبات NMR نشان می‌دهد مقادیر CSI در مدل C از سایر مدل‌ها بیشتر است. نتایج این تحقیق نشان می‌دهد نانولوله‌های بور فسفید آلایش یافته با Si، Ga وSiGa انتخاب مناسبی برای جذب و تهیه حسگر گاز N_2O هستند.

واژه‌های کلیدی: BPNTs، DFT، NMR، جذب N_2O، آلایش یافته Ga، Si و SiGa

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