



بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ





دانشگاه بیرجند

دانشکده علوم

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

بررسی جذب گاز فسژن بر روی نانولوله‌های آلومینیوم نیتريد

استاد راهنما:

دکتر حیدر رئیسی

استاد مشاور:

فریبا ملانیا

نگارش:

مهناز شهابی چشمه موسی

شهریور ماه ۹۳



مدیریت تحصیلات تکمیلی

صور تجلوه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

فرم شماره ۱۰

با تاییدات خداوند متعال جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی کارشناسی ارشد خانم / آقای مهناز شهبازی چشمه موسوی

به شماره دانشجویی : ۹۱۱۳۱۲۷۰۰۶ رشته : شیمی گرایش : شیمی فیزیک دانشکده : علوم تحت عنوان : بررسی جذب گاز نئون بر روی نانو لوله های آلومینیوم لیترید

به ارزش : واحد در ساعت ۱۲ : روز : دوشنبه مورخ : ۹۳/۶/۲۴

با حضور اعضای محترم جلسه دفاع و نماینده تحصیلات تکمیلی به شرح ذیل تشکیل گردید:

سمت	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضاء
استاد راهنمای اول	دکتر حیدر ریسی	دانشیار	
استاد راهنمای دوم			
استاد مشاور اول	دکتر فریبا ملالیا		
استاد مشاور دوم			
داور اول	دکتر حسین فرسی	دانشیار	
داور دوم	دکتر علی نیک اختر	استادیار	
نماینده تحصیلات تکمیلی	مهندس احمدحاجی زاده	مربی	

نتیجه ارزیابی دفاع که منوط به ارائه اصلاحات پیشنهادی توسط هیئت داوران حداکثر ظرف مدت یکماه پس از تاریخ دفاع می باشد، به شرح زیر مورد تایید قرار گرفت:

قبول (با درجه ≥ 18) و امتیاز : ≥ 18 (≥ 18)
 ۱- عالی (۲۰-۱۹) ۲- بسیار خوب (۱۸-۱۸/۹۹) ۳- خوب (۱۶-۱۷/۹۹) ۴- قابل قبول (۱۴-۱۵/۹۹)
 * دفاع مجدد * غیر قابل قبول

(بدیهی است عواقب آموزشی ناشی از عدم ارائه به موقع اصلاحات مزبور به عهده دانشجو می باشد)

کلیه مزایا اعم از چاپ، تکثیر، نسخه برداری، ترجمه، اقتباس و ... از پایان نامه کارشناسی ارشد برای دانشگاه بیرجند محفوظ است. نقل مطلب با ذکر منبع بلامانع است.

تقدیم به مهربان فرشتگانی که:

لحظات ناب باور بودن، لذت و غرور دانستن، جسارت خواستن،
عظمت رسیدن و تمام تجربه های یکتا و زیبای زندگی، مدیون حضور
سبز آنهاست

تقدیم به خانواده عزیزم.

از پدر و مادر عزیزم... این دو معلم بزرگوایم... که همواره بر کوتاهی و درشتی من، قلم عفو کشیده و کریمانه از کنار غفلت هایم گذشته اند و در تمام عرصه های زندگی یار و یآوری بی چشم داشت برای من بوده اند؛

از همسفران مهربان زندگیم خواهرانم و برادرم که با هم آغاز کردیم، در کنار هم آموختیم و به امید هم به آینده چشم می دوزیم. قلبم لبریز از عشق به شماست و خوشبختی تان منتهای آرزویم؛

از استاد با کمالات و شایسته؛ جناب آقای دکتر رئیسی که در کمال سعه صدر، با حسن خلق و فروتنی، از هیچ کمکی در این عرصه بر من دریغ نمودند و زحمت راهنمایی این رساله را بر عهده گرفتند؛

از استاد مشاور محترم سرکارخانم ملانیا، بابت راهنمایی های صمیمانه ایشان؛

از اساتید محترم جناب آقای دکتر حسین فرسی و دکتر علی نیک اختر که زحمت داوری این رساله را متقبل شدند؛

از جناب آقای مهندس حاجی زاده که به عنوان نماینده تحصیلات تکمیلی در جلسه دفاعیه حضور داشتند سپاسگزارم.

و با تشکر خالصانه خدمت همه کسانی که به نوعی مرا در به انجام رساندن این مهم یاری نموده اند.

بررسی جذب گاز فسژن بر روی نانولوله‌های آلومینیوم نیتريد

به وسیله ی:

مهناز شهابی چشمه موسی

چکیده:

محاسبات نظری تابعی چگالی (DFT) مربوط به ۱۹ آرایش ممکن جذب فسژن بر روی نانولوله آلومینیوم نیتريد گزارش شده است. این محاسبات برای تمامی آرایش های مذکور در سطح *B3LYP/6-31G و در فاز گاز انجام گردیده است. فرکانس های ارتعاشی نوسانگر هماهنگ نیز در همین سطح به منظور تأیید ماهیت نقاط ایستا و همچنین برای تصحیح انرژی نقطه صفر (ZPVE) تخمین زده شده اند. نظریه اتم ها در مولکول های بادر برای بررسی نقاط بحرانی و مطالعه ماهیت پیوند برهمکنش بین مولکولی در این سیستم ها استفاده شده است. همچنین، برای فهم بهتر ماهیت برهمکنش بین مولکولی، بررسی های اوربیتال پیوندی طبیعی (NBO) صورت گرفت. محاسبات بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) و پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (LUMO) با فاصله اوربیتال های جبهه ای موجوداند. بعلاوه، پارامترهای NMR، پارامترهای ترمودینامیکی، فرکانس گروه کربونیل آرایش های مختلف در همان سطح انجام گردید. اطلاعات نظری در مورد شکل، توزیع دانسیته الکترونی و موقعیت های واکنش پذیر شیمیایی مولکول فسژن، نانولوله و پایدارترین سیستم به وسیله ترسیم سطح دانسیته الکترونی با پتانسیل الکترواستاتیکی مولکول (MEP) بدست آمد. دانسیته حالتها و اوربیتال مولکولی سیستم های فسژن-نانولوله، برای فهم تغییرات الکترونی ساختاری، هدایت الکتریکی و انرژی اتصال در طی فرآیند جذب مورد بررسی قرار گرفت. در ادامه به منظور بررسی ویژگی ها و رفتار اتم های فلزی داپ شده بر جذب مولکول فسژن بر روی نانولوله آلومینیوم نیتريد در پایدارترین آرایش، اتم آلومینیوم در بالای نانولوله آلومینیوم نیتريد با اتم های گالیم و اسکاندیم جایگزین شد و ساختار آرایش های داپ شده بهینه گردید. سپس انرژی جذبی، پارامترهای ترمودینامیکی، ساختار مولکولی، برهمکنش بین مولکولی آرایش های داپ شده با استفاده از روش B3LYP با سطح پایه *6-31G در فاز گاز مورد مطالعه قرار گرفت. ویژگی های توپولوژیکی توزیع دانسیته الکترونی برای برهمکنش های بین مولکولی O...Ga/Sc بر حسب نظریه بادر اتم ها در مولکول ها (AIM) مورد ارزیابی قرار گرفت. روش اوربیتال پیوندی طبیعی (NBO)، پارامترهای NMR، همچنین فرکانس های $\nu_{C=O}$ مدل های داپ شده در سطح *B3LYP/6-31G به منظور استخراج برهمکنش های پیوند بین مولکولی، محاسبه شدند.

واژگان کلیدی: نانولوله آلومینیوم نیتريد، جذب گاز، روش تابعی چگالی، اوربیتال طبیعی پیوندی، نظریه اتم ها در مولکول های بادر

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول : فناوری نانو و نانوحسگرها

۱-۱-۱	مقدمه	۲
۱-۱-۱	تاریخچه نانو در جهان	۲
۲-۱	ماهیت کوانتومی دنیای نانو	۳
۱-۲-۱	کامپیوترهای کوانتومی	۴
۲-۲-۱	محاسبات کوانتومی	۴
۳-۱	حسگرها	۶
۱-۳-۱	خصوصیات حسگرها	۷
۲-۳-۱	انواع نانوحسگرها	۷
۱-۲-۳-۱	استفاده از نقاط کوانتومی در تولید نانوحسگرها	۸

- ۸-۲-۳-۱ استفاده از نانولوله‌ها در تولید نانوحسگرها.....
- ۹-۲-۳-۱ استفاده از نانوایزارها در تولید نانوحسگرها.....
- ۹-۳-۱ طراحی محاسباتی.....
- ۹-۳-۱ نانوحسگرها و کنترل آلودگی هوا.....
- ۱۰-۳-۱ جذابیت‌های نانوحسگرها.....
- ۱۱-۴-۱ نانولوله‌های کربنی.....
- ۱۲-۵-۱ نانولوله آلومینیوم نیتريد.....
- ۱۳-۵-۱ بررسی نظری نانولوله‌های آلومینیوم نیتريد.....
- ۱۴-۲-۵-۱ ساخت.....
- ۱۴-۳-۵-۱ کاربردها.....
- ۱۴-۶-۱ گاز فسژن.....

فصل دوم : شیمی محاسباتی

- ۱۷-۱-۲ مقدمه.....
- ۱۷-۲-۲ دلایل ظهور مکانیک کوانتومی.....
- ۱۸-۲-۲ زمینه ظهور مکانیک کوانتومی.....
- ۱۸-۲-۲ حوزه عمل مکانیک کوانتومی.....

- ۳-۲-۲ دیدگاه اینشتین نسبت به مکانیک کوانتومی ۱۹
- ۳-۲ اصل عدم قطعیت هایزنبرگ ۱۹
- ۴-۲ معادله موجی شرودینگر ۲۰
- ۱-۴-۲ توجیه معادله شرودینگر ۲۱
- ۲-۴-۲ توجیه معادله شرودینگر در حالت کلی ۲۱
- ۳-۴-۲ کاربرد معادله شرودینگر ۲۳
- ۵-۲ انواع روش‌های محاسباتی ۲۳
- ۶-۲ روش‌های سری آغازین ۲۳
- ۱-۶-۲ تقریب بورن-اپنهايمر ۲۴
- ۲-۶-۲ سری‌های پایه ۲۵
- ۱-۲-۶-۲ سری پایه ظرفیتی شکافته ۲۵
- ۲-۲-۶-۲ مجموعه پایه همبستگی سازگار ۲۶
- ۳-۲-۶-۲ سری پایه زتایی-دوتایی ۲۶
- ۴-۲-۶-۲ سری پایه قطبیده ۲۷
- ۵-۲-۶-۲ سری پایه کمینه ۲۷
- ۶-۲-۶-۲ سری پایه پخش شده ۲۸
- ۷-۲-۶-۲ سری پایه اندازه حرکت زاویه‌ای بالا ۲۸

- ۲-۶-۳ همبستگی الکترون ۲۹
- ۲-۷-۷ روش‌های نیمه تجربی ۲۹
- ۲-۷-۱ روش هوکل ۳۰
- ۲-۷-۲ روش هوکل توسعه یافته ۳۱
- ۲-۷-۳ روش PPP ۳۱
- ۲-۷-۴ روش CNDO ۳۱
- ۲-۷-۵ روش MINDO ۳۲
- ۲-۷-۶ روش INDO ۳۲
- ۲-۷-۷ روش ZINDO ۳۳
- ۲-۷-۸ روش AM1 ۳۳
- ۲-۸ نظریه تابعی چگالی ۳۳
- ۲-۹ تئوری اتم‌ها در مولکول‌ها ۳۵
- ۲-۱۰ نظریه اوربیتال پیوندی طبیعی (NBO) ۳۸
- ۲-۱۰-۱ محاسبه انرژی اختلال مرتبه دوم با NBO ۳۹
- ۲-۱۰-۲ اطلاعات حاصل از NBO ۳۹
- ۲-۱۱ ثابت‌های پوشیدگی رزونانس مغناطیسی هسته (NMR) ۴۰

فصل سوم: بررسی اثر جذب گاز فسژن بر روی نانولوله آلومینیوم نیتريد

۳-۱ مقدمه ۴۲

۳-۲ روش محاسبات ۴۳

۳-۳ بررسی اثر جذب گاز فسژن بر روی ساختار مولکولی، دانسیته الکترونی و قدرت برهمکنش بین

گاز فسژن و نانولوله آلومینیوم نیتريد در فاز گازی ۴۴

۳-۳-۱ بررسی پارامترهای ساختاری صورت بندی های مختلف مولکول فسژن جذب شده بر سطح

نانولوله آلومینیوم نیتريد

..... ۴۵

۳-۳-۲ ممان دوقطبی ۵۴

۳-۳-۳ تجزیه و تحلیل نظریه اتم ها در مولکول های بادر ۵۴

۳-۳-۴ تجزیه و تحلیل NBO ۵۷

۳-۴ اوربیتال های مولکولی جبهه ای ۵۷

۳-۴-۱ پتانسیل الکترواستاتیکی مولکولی (MEP) ۶۰

۳-۴-۲ دانسیته حالتها (DOS) ۶۲

۳-۵ بررسی رزونانس مغناطیسی هسته ۶۶

فصل چهارم : مطالعه اثر داپ کردن اتم های آلومینیوم سطح نانولوله بر قدرت برهمکنش بین

گاز فسژن و نانولوله آلومینیوم نیتريد داپ شده

۱-۴	مقدمه	۶۹
۲-۴	روش محاسبات	۷۰
۳-۴	بررسی اثر داپ کردن اتم های فلزی بر روی ساختار مولکولی، دانسیته الکترونی و قدرت برهمکنش بین گاز فسژن و نانولوله آلومینیوم نیتريد داپ شده	۷۱
۱-۳-۴	تجزیه و تحلیل پارامترهای ساختاری	۷۲
۲-۳-۴	تجزیه و تحلیل AIM	۷۴
۳-۳-۴	تجزیه و تحلیل NBO	۷۵
۴-۴	اوربیتال های مولکولی جبهه ای	۷۵
۱-۴-۴	پتانسیل الکترواستاتیکی صورت بندی های داپ شده	۷۸
۲-۴-۴	تجزیه و تحلیل نمودارهای دانسیته الکترونی حالت های صورت بندی های داپ شده	۷۹
۵-۴	بررسی رزونانس مغناطیسی هسته	۸۰
	نتیجه گیری	۸۱
	پیشنهاد برای کار آینده	۸۳
	پیوست جداول	۸۴
	مراجع	۱۴۴

فهرست جدول ها

عنوان	صفحه
جدول ۱-۳: پارامترهای ساختاری و توپولوژیکی نانولوله زیگزاگی آلومینیوم نیتريد (۶،۰) و گاز فسژن.....	۸۵
جدول ۲-۳: پارامترهای ساختاری در آرایش های اکسیژن-پایین	۸۶
جدول ۳-۳: پارامترهای ساختاری در آرایش های کلر-پایین.....	۸۷
جدول ۴-۳: فرکانس کششی (cm^{-1})، ممان دایپل (DM) برحسب Deby، انرژی جذبی مولکول فسژن و مقادیر محاسبه شده ΔH ، ΔG و $T\Delta S$ آرایش های مورد مطالعه برحسب KJ/mol.....	۸۸
جدول ۵-۳: پارامترهای ساختاری و توپولوژیکی در برهمکنش بین مولکولی تمامی آرایش ها.....	۸۹
جدول ۶-۳: پارامترهای توپولوژیکی مربوط به آرایش های اکسیژن-پایین	۹۰
جدول ۷-۳: پارامترهای توپولوژیکی مربوط به آرایش های کلر-پایین	۹۳
جدول ۸-۳: بررسی مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم آرایش ها.....	۹۵
جدول ۹-۳: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱.....	۹۶
جدول ۱۰-۳: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۲.....	۹۸

- جدول ۳-۱۱: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۳.....۱۰۰
- جدول ۳-۱۲: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۴.....۱۰۲
- جدول ۳-۱۳: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۵.....۱۰۴
- جدول ۳-۱۴: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۶.....۱۰۶
- جدول ۳-۱۵: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۷.....۱۰۸
- جدول ۳-۱۶: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۸.....۱۱۰
- جدول ۳-۱۷: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۹.....۱۱۲
- جدول ۳-۱۸: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱۰.....۱۱۴
- جدول ۳-۱۹: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱۱.....۱۱۶
- جدول ۳-۲۰: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱۲.....۱۱۸
- جدول ۳-۲۱: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱۳.....۱۲۱
- جدول ۳-۲۲: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱۴.....۱۲۳
- جدول ۳-۲۳: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱۵.....۱۲۵
- جدول ۳-۲۴: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱۶.....۱۲۷
- جدول ۳-۲۵: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱۷.....۱۲۹
- جدول ۳-۲۶: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱۸.....۱۳۱
- جدول ۳-۲۷: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش شماره ۱۹.....۱۳۳

- جدول ۳-۲۸: انرژی‌های مربوط به بالاترین سطح اشغال شده و پایین‌ترین سطح اشغال نشده (برحسب eV) ، شکاف انرژی ΔE_{H-L} (برحسب eV)، مقادیر سختی شیمیایی و پتانسیل شیمیایی برحسب eV برای آرایش‌های مورد مطالعه ۱۳۵
- جدول ۳-۲۹: مقادیر ایزوتروپی و آنیزوتروپی (ppm) موقعیت‌های جذبی در آرایش‌های مورد مطالعه و نانولوله مجزا ۱۳۶
- جدول ۴-۱: پارامترهای ساختاری و توپولوژیکی نانولوله‌های داپ شده با اتم گالیم و اسکاندیم ۱۳۷
- جدول ۴-۲: پارامترهای ساختاری و توپولوژیکی نانولوله‌های داپ شده با اتم گالیم و اسکاندیم در حضور مولکول فسژن ۱۳۸
- جدول ۴-۳: پارامترهای ترمودینامیکی و انرژی جذبی (kJ/mol) ، انرژی بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده، پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده و فاصله بین اوربیتال‌های مولکولی جبهه‌ای (eV) ، سختی شیمیایی (eV) ، پتانسیل شیمیایی (eV) ، فرکانس کششی (cm^{-1}) ، ممان دوقطبی (Deby) ، مقادیر انرژی (Kcal/mol) و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش‌های داپ شده با اتم گالیم و اسکاندیم ۱۳۹
- جدول ۴-۴: فاصله (\AA) و نوع برهمکنش بین مولکولی، پارامترهای توپولوژیکی برهمکنش بین مولکولی (a.u) برای آرایش‌های داپ شده با اتم‌های گالیم و اسکاندیم ۱۴۰
- جدول ۴-۵: مقادیر ایزوتروپی و آنیزوتروپی (ppm) موقعیت‌های جذبی در آرایش‌های داپ شده و نانولوله داپ شده مجزا ۱۴۰
- جدول ۴-۶: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش‌های داپ شده با اتم گالیم ۱۴۱

جدول ۴-۷: مقادیر انرژی و عدد اشغال و انتقالات الکترونی مهم برای آرایش داپ شده با اتم

اسکاندیم.....۱۴۳

فهرست شکل ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۲: اوربیتال های ظرفیتی-شکافتی	۲۶
شکل ۲-۲: نقشه کانتوری دانسیته الکترونی در مولکول BF_3	۳۷
شکل ۳-۲: گراف مولکولی (a) cubane و (b) 4-methyl-1,12-difluoro[4]helicene	۳۸
شکل ۱-۳: ساختار های بهینه شده مولکول فسژن و نانولوله آلومینیوم نیتريد	۴۳
شکل ۲-۳: نمایش ساختار های اولیه آرایش های مورد مطالعه	۴۸
شکل ۳-۳: ساختار های بهینه شده آرایش های مورد بررسی	۵۰
شکل ۴-۳: نمودار E_{ads} بر حسب فاصله برهمکنش بین مولکولی	۵۲
شکل ۵-۳: نمودار E_{ads} بر حسب ویژگی های نقطه بحرانی برهمکنش بین مولکولی	۵۶
شکل ۶-۳: نمودار $\rho_{interaction}$ بر حسب فاصله برهمکنش بین مولکولی	۵۶
شکل ۷-۳: نمودار اوربیتال مولکولی مولکول فسژن، نانولوله آلومینیوم نیتريد مجزا و پایدارترین آرایش مورد مطالعه	۵۹

- شکل ۳-۸: پتانسیل الکترواستاتیکی نانولوله مجزا و مولکول فسژن ۶۱
- شکل ۳-۹: پتانسیل الکترواستاتیکی پایدارترین آرایش مورد بررسی ۶۲
- شکل ۳-۱۰: نمودارهای دانسیته الکترونی حالت‌های نانولوله آلومینیوم نیتريد مجزا و مولکول فسژن..... ۶۲
- شکل ۳-۱۱: نمودارهای دانسیته الکترونی حالت‌های آرایش های مورد مطالعه ۶۶
- شکل ۴-۱: ساختار بهینه شده نانولوله‌های آلومینیوم نیتريد داپ شده با اتم های اسکاندیم و گالیم .. ۷۲
- شکل ۴-۲: ساختار های بهینه شده آرایش های داپ شده با اتم های گالیم و اسکاندیم ۷۳
- شکل ۴-۳: نمودار اوربیتال مولکولی نانولوله آلومینیوم نیتريد داپ شده با اتم اسکاندیم ۷۶
- شکل ۴-۴: نمودار اوربیتال مولکولی نانولوله آلومینیوم نیتريد داپ شده با اتم گالیم ۷۶
- شکل ۴-۵: نمودار اوربیتال مولکولی آرایش داپ شده با اتم اسکاندیم ۷۷
- شکل ۴-۶: نمودار اوربیتال مولکولی آرایش داپ شده با اتم گالیم ۷۷
- شکل ۴-۷: پتانسیل الکترواستاتیکی نانولوله و آرایش داپ شده با اتم اسکاندیم ۷۸
- شکل ۴-۸: پتانسیل الکترواستاتیکی نانولوله و آرایش داپ شده با اتم گالیم ۷۸
- شکل ۴-۹: نمودارهای دانسیته الکترونی حالت‌های آرایش های داپ شده با اتم های اسکاندیم و گالیم ۷۹

فهرست نشانه های اختصاری:

AINNT.....	نانولوله آلومینیوم نیتريد
AIM.....	اتم در مولکول
DFT.....	نظريه تابعی چگال
$E^{(2)}$	انرژی اختلال مرتبه دوم
NBO.....	اوربیتال طبیعی پیوندی
O.N.....	عدد اشغال
$COCl_2$	مولکول فسژن
$r_{interaction}$	فاصله برهمکنش بین مولکول
E_{ads}	انرژی جذبی
DOS.....	دانسیته حالتها
MEP.....	پتانسیل الکترواستاتیکی مولکولی