

١٥٨٠٩٣



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد "M. Sc"

گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی و مطالعه جذب گازهای CO و NO بر روی

نانو خوشه های بورنیتريد $(BN)_n=3-5$

استاد راهنما:

دکتر عبدالحکیم پنق

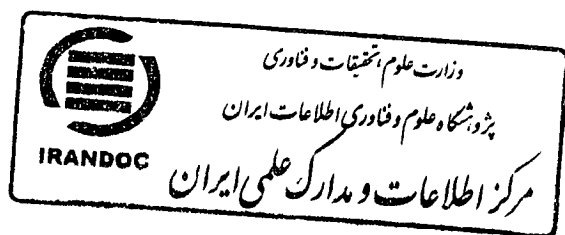
استاد مشاور:

دکتر مجید مظفری

نگارش:

حامد قربان پور

زمستان ۸۹



۱۵۸۰۹۳

۱۳۹۰/۳/

A



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه ، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت کارشناسی ارشد «M.Sc»

گرایش : شیمی فیزیک

عنوان :

بررسی و مطالعه جذب گازهای CO و NO بر روی نانو خوشه های

بورنیتريد $(BN)_n$ n=3-5

نگارش :

حامد قربان پور

زمستان ۱۳۸۹

۱. دکتر عبدالحکیم پنق

۲. دکتر مجید مظفری

۳. دکتر فرامرز طیاری

۴. دکتر بهزاد چهکندی

هیات داوران :

۱۳۹۰ / ۳ / ۸



بسمه تعالی

تعهد نامه اصالت رساله پایان نامه

اینجانب حامد قربان پور دانش آموخته مقطع کارشناسی ارشد ناپیوسته در رشته شیمی فیزیک که در تاریخ ۱۳۸۹/۱۲/۱۴ از پایان نامه خود تحت عنوان " بررسی و مطالعه جذب گازهای CO و NO بر روی نانو خوشه های بور-نیتريد $(BN)_{n=3-5}$ " با کسب نمره ۱۷ و درجه عالی دفاع نموده ام بدین وسیله متعهد می شوم:

- (۱) این پایان نامه /رساله حاصل تحقیق و پژوهش انجام شده توسط اینجانب بوده و در مواردی که از دستاوردهای علمی و پژوهشی دیگران (اعم از پایان نامه، کتاب، مقاله و...) استفاده نموده ام، مطابق ضوابط و رویه موجود، نام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آن را در فهرست مربوطه ذکر و درج کرده ام.
- (۲) این پایان نامه /رساله قبلا برای دریافت هیچ مدرک تحصیلی (هم سطح، پایین تر یا بالاتر) در سایر دانشگاه ها و موسسات آموزش عالی ارائه نشده است.
- (۳) چنانچه بعد از فراغت تحصیل، قصد استفاده و هر گونه بهره برداری اعم از چاپ کتاب، ثبت اختراع و... از این پایان نامه داشته باشم، از حوزه معاونت پژوهشی واحد مجوزهای مربوطه را اخذ نمایم.
- (۴) چنانچه در هر مقطعی زمانی خلاف موارد فوق ثابت شود، عواقب ناشی از آن را می پذیرم و واحد دانشگاهی مجاز است با این جانب مطابق ضوابط و مقررات رفتار نموده و در صورت ابطال مدرک تحصیلی ام هیچگونه ادعایی نخواهم داشت.

حامد قربان پور

امضاء و تاریخ

۹۰/۱۳

سپاسگزارم ؛

خدای بی همتا را که در لحظه لحظه زندگی ، وجودش را با تمام وجودم حس کردم و در تمام طول حیاتم از او یاری طلبیده و می طلبم از او می خواهم به من اراده ای توانا دهد ، تا تمام وجودم را وقف مستمندان و نیازمندان سازم .

از او می خواهم مرا همیشه یاری کند تا خدمتگزار خوبی برای تمام نیازمندان جامعه باشم .

او خود حافظ و هادی همگان می باشد و بس

با تشکر و سپاس بی پایان از زحمات ارزشمند اساتید گرانقدرم

جناب آقای دکتر عبدالحکیم پنق

جناب آقای دکتر مجید مظفری

جناب آقای دکتر فرامرز طیاری

جناب آقای دکتر بهزاد چهکندی

و سایر اساتیدی که در دوره تحصیل مرا یاری نمودند .

باشد که سایه پر فروغ این اساتید فرزانه همواره روشنایی بخش جامعه علمی باشد .

تقدیم به الهه عشق ، ملکه خوبیها ؛ مادرم

فرشته مهربانی که تمام مرارتها را به جان خرید ، همواره پشتیبان من در تمام مراحل زندگیم بوده است و به من درس پایداری آموخت ، مادر عزیزم لحظه لحظه زندگیم آکنده از مهربانی ها و محبتهای بی دریغ توست .

این تقدیم بی ارجحی است از ذره به خورشید .

تقدیم به اسطوره مردانگی ؛ پدرم

که وجودم ، همه برایش رنج بود و رنج

وجودش برای همه عشق بود و عشق

توانش رفت تا به توانایی برسم

با نگاه پر فروغش و با عشق به زندگی اش به من درس زندگی آموخت

تقدیم به خواهران عزیزتر از جانم و برادران عزیزم ؛

یاران و یاوران همیشگی ام که در تمام مراحل زندگی ، یاری ام کردند .

موفقیت شما در تمام مراحل زندگی آرزوی من است .

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	چکیده
	فصل اول: مقدمه، تاریخچه نانو، برهمکنش بین مولکولی
۲	۱-۱. نانو تکنولوژی
۳	۱-۲. دیدگاههای موجود در نانو تکنولوژی
۴	۱-۲-۱. تاریخچه نانو تکنولوژی
۵	۱-۲-۲. دسته بندی نانو ذرات
۵	۱-۲-۳. کاربردهای فناوری نانو
۱۱	۱-۳. برهم کنش های بین مولکولی
۱۱	۱-۴. انواع برهم کنش های بین مولکولی برهم کنش های بین مولکولی از نظر دیدگاه کیفی
۱۲	۱-۴-۱. برهم کنش های الکترواستاتیک مستقیم
۱۲	۱-۴-۱-۱. حالت عمومی
۱۲	۱-۴-۱-۲. ممان های چند قطبی
۱۲	۱-۴-۱-۲. برهم کنش های رزونانسی
۱۳	۱-۴-۱-۳. برهم کنش های قطبشی
۱۳	۱-۴-۱-۳-۱. برهم کنش القایی
۱۴	۱-۴-۱-۳-۲. برهم کنش های پاشیدگی (پراکندگی)
۱۴	۱-۴-۱-۴. برهم کنش های تبادلی
۱۴	۱-۴-۱-۵. برهم کنش های تأخیری
۱۵	۱-۴-۱-۶. برهم کنش های تداخلی (مغناطیسی)
۱۵	۱-۴-۱-۷. برهم کنش بین اجسام ماکروسکوپی
۱۵	۱-۵. نیروها در شیمی
۱۶	۱-۵-۱. نیروهای جاذبه

- ۱-۵-۱-۱. نیروهای اولیه ----- ۱۶
- ۱-۵-۱-۲. نیروهای ثانویه ----- ۱۷
- ۱-۵-۱-۲-۱. نیروی دو قطبی - دو قطبی ----- ۱۸
- ۱-۵-۱-۲-۲. نیروی دو قطبی - دو قطبی القا شده ----- ۱۹
- ۱-۵-۱-۳-۲. نیروی پاشیدگی ----- ۱۹
- ۱-۵-۱-۴-۲. پیوند هیدروژنی ----- ۲۰
- ۱-۵-۲. نیروهای دافعه ----- ۲۰

فصل دوم: روش های محاسبات کوانتومی

- ۱-۲. مقدمه ----- ۲۲
- ۲-۲. طبقه بندی روش های کوانتومی ----- ۲۳
- ۱-۲-۲. روش های نیمه تجربی ----- ۲۳
- ۲-۲-۲. روش های آغازین ----- ۲۵
- ۱-۲-۲-۲. روش هارتری - فاک (HF) ----- ۲۵
- ۲-۲-۲-۲. روش ماتریس دانسیته ----- ۲۶
- ۳-۲-۲-۲. تئوری اختلال Muller-plestet ----- ۲۷
- ۴-۲-۲-۲. روش های فوق هارتری - فاک (روش های همبستگی الکترون) ----- ۲۷
- ۵-۲-۲-۲. روش های همبستگی ورد شی ----- ۲۸
- ۶-۲-۲-۲. روش های همبستگی اختلال ----- ۲۹
- ۷-۲-۲-۲. توابع پایه ----- ۳۰
- ۸-۲-۲-۲. سری های پایه ----- ۳۳
- ۹-۲-۲-۲. سری های پایه نوع پاپل ----- ۳۴
- ۳-۲. تئوری کوانتومی اتمها در مولکولها (QTAIM) ----- ۳۶
- ۳-۱-۲. توپولوژی چگالی الکترون از دیدگاه QTAIM ----- ۳۶

- ۳۸-۲-۳-۲. مفاهیم نقطه ی بحرانی، مسیر پیوند، مسیر ویربال، گراف مولکولی، گراف ویربال -----
- ۴۰-۳-۳-۲. تقسیم بندی اتمی خواص مولکولی -----
- ۴۱-۴-۳-۲. دسته بندی نقاط بحرانی -----
- ۴۴-۵-۳-۲. خواص پیوندی -----
- ۴۴-۱-۵-۳-۲. چگالی الکترونی در نقطه ی بحرانی پیوند (ρ_b) -----
- ۴۴-۲-۵-۳-۲. لاپلاسیان چگالی الکترونی در نقطه ی بحرانی پیوند $(\nabla^2\rho_b)$ -----
- ۴۵-۳-۵-۳-۲. بیضیت پیوند (ϵ) -----
- ۴۶-۴-۵-۳-۲. چگالی های انرژی در نقطه ی بحرانی پیوند -----
- ۴۷-۵-۵-۳-۲. عدم استقرار الکترون (تبادل) بین اتمهای پیوند یافته، بعنوان میزانی از مرتبه ی پیوند -----

فصل سوم: روش کار، محاسبات

- ۴۹-۱-۳. بحث مقدماتی -----
- ۵۰-۱-۳. بخش اول -----
- ۵۰-۱-۳-۱. ترسیم و تعیین شکل هندسی نانو خوشه های بورنیتريد $(BN)_{n=3-5}$ -----
- ۵۱-۲-۱-۳. بهینه سازی ساختار نانو خوشه های بورنیتريد خالص $(BN)_{n=3-5}$ -----
- ۵۲-۳-۱-۳. جذب کربن مونوکسید بر روی نانو خوشه های بورنیتريد -----
- ۵۲-۱-۳-۱-۳. بهینه سازی ساختار نانوخوشه های بورنیتريد $(BN)_{n=3-5}$ با جذب CO از طریق کربن -----
- ۵۶-۲-۳-۱-۳. بهینه سازی ساختار نانو خوشه های بورنیتريد $(BN)_{n=3-5}$ با جذب CO از طریق اکسیژن -----
- ۶۰-۴-۱-۳. جذب نیتروژن مونوکسید بر روی نانو خوشه های بورنیتريد -----
- ۶۱-۱-۴-۱-۳. بهینه سازی ساختار نانو خوشه های بورنیتريد $(BN)_{n=3-5}$ با جذب NO از طریق نیتروژن -----

- ۳-۱-۴. بهینه سازی ساختار نانو خوشه های بورنیتريد $(BN)_{n=3-5}$ با جذب NO از طریق اکسیژن ----- ۶۵
- ۳-۱-۵. محاسبه انرژی بر همکنش با تصحیح BSSE ----- ۷۱
- ۳-۲. بخش دوم ----- ۷۵
- ۳-۲-۱. تحلیل پارامترهای AIM ----- ۷۵
- ۳-۲-۱-۱. تحلیل پارامتر های AIM برای جذب مولکول CO از طریق کربن به نانو خوشه های بورنیتريد ----- ۷۵
- ۳-۲-۱-۲. تحلیل پارامترهای AIM برای جذب مولکول CO از طریق اکسیژن به نانو خوشه های بورنیتريد ----- ۷۷
- ۳-۲-۱-۳. تحلیل پارامترهای AIM برای جذب مولکول NO از طریق نیتروژن به نانو خوشه های بورنیتريد ----- ۸۰
- ۳-۲-۱-۴. تحلیل پارامترهای AIM برای جذب مولکول NO از طریق اکسیژن به نانو خوشه های بورنیتريد ----- ۸۱
- ۳-۳. بخش سوم ----- ۹۰
- ۳-۱-۳. آنالیز NBO ----- ۸۶
- ۳-۴. نتیجه گیری نهایی ----- ۹۰
- پ-۱). ساختار بهینه شده نانو خوشه بور نیتريد خالص $(BN)_3$ ----- ۹۱
- پ-۲). برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشه بور نیتريد خالص $(BN)_3$ ----- ۹۱
- پ-۳). ساختار بهینه شده کمپلکس $(BN)_3 \dots CO$ ----- ۹۲
- پ-۴). برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشه بورنیتريد در کمپلکس $(BN)_3 \dots CO$ ----- ۹۲
- پ-۵). انتقال محاسبه شده در برهمکنش بین مولکولی در کمپلکس $(BN)_3 \dots CO$ ----- ۹۳

- ۹۴----- $(BN)_3 \dots OC$ (پ-۶). ساختار بهینه شده کمپلکس
- ۹۴- $(BN)_3 \dots OC$ (پ-۷). برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشه بورنیتريد در کمپلکس
- ۹۵----- $(BN)_3 \dots OC$ (پ-۸). انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بين مولکولی در کمپلکس
- ۹۶----- $(BN)_3 \dots NO$ (پ-۹). ساختار بهینه شده کمپلکس
- ۹۶ $(BN)_3 \dots NO$ (پ-۱۰). برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشه بورنیتريد در کمپلکس
- ۹۷----- $(BN)_3 \dots NO$ (پ-۱۱). انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بين مولکولی در کمپلکس
- ۹۸----- $(BN)_3 \dots ON$ (پ-۱۲). ساختار بهینه شده کمپلکس
- ۹۸ $(BN)_3 \dots ON$ (پ-۱۳). برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشه بورنیتريد در کمپلکس
- ۹۹----- $(BN)_3 \dots ON$ (پ-۱۴). انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بين مولکولی در کمپلکس
- ۱۰۰----- $(BN)_4$ (پ-۱۵). ساختار بهینه شده نانوخوشه بور نیتريد خالص
- ۱۰۰----- $(BN)_4$ (پ-۱۶). برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشه بور نیتريد خالص
- ۱۰۱----- $(BN)_4 \dots CO$ (پ-۱۷). ساختار بهینه شده کمپلکس
- ۱۰۱ $(BN)_4 \dots CO$ (پ-۱۸). برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشه بورنیتريد در کمپلکس
- ۱۰۲----- $(BN)_4 \dots CO$ (پ-۱۹). انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بين مولکولی در کمپلکس
- ۱۰۴----- $(BN)_4 \dots OC$ (پ-۲۰). ساختار بهینه شده کمپلکس
- ۱۰۴ $(BN)_4 \dots OC$ (پ-۲۱). برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشه بورنیتريد در کمپلکس
- ۱۰۵----- $(BN)_4 \dots OC$ (پ-۲۲). انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بين مولکولی در کمپلکس
- ۱۰۶----- $(BN)_4 \dots NO$ (پ-۲۳). ساختار بهینه شده کمپلکس

- ۱۰۶- (پ-۲۵) . برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشهء بورنیتريد در کمپلکس $(BN)_4 \dots NO$
- ۱۰۷- (پ-۲۶) . انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بين مولکولی در کمپلکس $(BN)_4 \dots NO$
- ۱۰۸- (پ-۲۷) . ساختار بهينه شدهء کمپلکس $(BN)_4 \dots ON$
- ۱۰۸- (پ-۲۸) . برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشهء بورنیتريد در کمپلکس $(BN)_4 \dots ON$
- ۱۰۹- (پ-۲۹) . انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بين مولکولی در کمپلکس $(BN)_4 \dots ON$
- ۱۱۰- (پ-۳۰) . ساختار بهينه شده نانو خوشه بور نیتريد خالص $(BN)_5$
- ۱۱۰- (پ-۳۱) . برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشهء بور نیتريد خالص $(BN)_5$
- ۱۱۱- (پ-۳۲) . ساختار بهينه شدهء کمپلکس $(BN)_5 \dots CO$
- ۱۱۱- (پ-۳۳) . برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشهء بورنیتريد در کمپلکس $(BN)_5 \dots CO$
- ۱۱۴- (پ-۳۴) . انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بين مولکولی در کمپلکس $(BN)_5 \dots CO$
- ۱۱۵- (پ-۳۵) . ساختار بهينه شدهء کمپلکس $(BN)_5 \dots OC$
- ۱۱۵- (پ-۳۶) . برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشهء بورنیتريد در کمپلکس $(BN)_5 \dots OC$
- ۱۱۶- (پ-۳۷) . انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بين مولکولی در کمپلکس $(BN)_5 \dots OC$
- ۱۱۷- (پ-۳۸) . ساختار بهينه شدهء کمپلکس $(BN)_5 \dots NO$
- ۱۱۷- (پ-۳۹) . برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشهء بورنیتريد در کمپلکس $(BN)_5 \dots NO$
- ۱۱۹- (پ-۴۰) . انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بين مولکولی در کمپلکس $(BN)_5 \dots NO$
- ۱۲۰- (پ-۴۱) . ساختار بهينه شدهء کمپلکس $(BN)_5 \dots ON$
- ۱۲۰- (پ-۴۲) . برهمکنش (kcal/mol) درون مولکولی خوشهء بورنیتريد در کمپلکس $(BN)_5 \dots ON$

۱۲۱----- $(BN)_5 \dots ON$ (پ-۴۳). انتقال محاسبه شده دربرهمکنش بین مولکولی در کمپلکس

۱۲۲----- فهرست منابع فارسی

۱۲۳----- فهرست منابع غیر فارسی

۱۲۵----- چکیده انگلیسی

فهرست شکل ها

عنوان	صفحه
شکل (۱-۱) . نیروی جاذبه دوقطبی - دوقطبی بین دو مولکول کلرومتان	۱۸
شکل (۲-۱) . طرحی از نیروی جاذبه دوقطبی - دوقطبی القا شده	۱۹
شکل (۱-۲) . توابع اسلیتری و گوسی برای اوربیتال 1s	۳۲
شکل (۲-۲) . مولکول BF ₃ از دیدگاه QTAIM	۳۸
شکل (۳-۲) . گراف مولکولی (a) کوبان و (b) ۴-متیل - ۱ و ۱۲-دی فلئور و [4] هلیسن	۴۳
شکل (۱-۳) . ساختار هندسی نانو خوشه های بورنیتريد خالص $(BN)_{n=3-5}$	۵۰
شکل (۲-۳) . رابطه بین تعداد مولکول های BN در خوشه ها با فاصله طول پیوند $(R_{B-N})BN$	
در $(BN)_{n=3-5}$	۵۱
شکل (۳-۳) . ساخت ساختارهای هندسی بهینه شده نانو خوشه های $(BN)_{n=3-5} \dots CO$	۵۳
شکل (۴-۳) . رابطه بین تعداد مولکول های BN در خوشه ها با فاصله طول پیوند $(R_{B-N})BN$	
در کمپلکس $(BN)_{n=3-5} \dots CO$	۵۵
شکل (۵-۳) . رابطه بین تعداد مولکول های BN در خوشه ها با فاصله بین مولکول CO و خوشه $(R_{B \dots C})$	
در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5} \dots CO$	۵۶
شکل (۶-۳) . ساخت ساختارهای هندسی بهینه شده نانو خوشه های $(BN)_{n=3-5} \dots OC$	۵۷
شکل (۷-۳) . رابطه بین تعداد مولکول های BN در خوشه ها با فاصله طول پیوند $(R_{B-N})BN$	
در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5} \dots OC$	۵۹
شکل (۸-۳) . رابطه بین تعداد مولکول های BN در خوشه ها با فاصله بین مولکول CO و خوشه $(R_{B \dots O})$	
در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5} \dots OC$	۶۰

شکل (۳-۹). ساختارهای هندسی بهینه شده نانو خوشه های $(BN)_{n=3-5} \dots NO$ ----- ۶۱

شکل (۳-۱۰). رابطه بین تعداد مولکول های BN در خوشه ها با فاصله طول پیوند $(R_{B-N})BN$

در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5} \dots NO$ ----- ۶۲

شکل (۳-۱۱). رابطه بین تعداد مولکول های BN در خوشه ها با فاصله بین مولکول NO و خوشه

در کمپلکس های $(R_{B \dots N})$ $(BN)_{n=3-5} \dots NO$ ----- ۶۴

شکل (۳-۱۲). ساختارهای هندسی بهینه شده نانو خوشه های $(BN)_{n=3-5} \dots ON$ ----- ۶۵

شکل های (۳-۱۳). رابطه بین تعداد مولکول های BN در خوشه ها با فاصله طول پیوند $(R_{B-N})BN$

در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5} \dots ON$ ----- ۶۷

شکل (۳-۱۴). رابطه بین تعداد مولکول های BN در خوشه ها با فاصله بین مولکول NO و خوشه

در کمپلکس های $(R_{B \dots O})$ $(BN)_{n=3-5} \dots ON$ ----- ۶۸

شکل ۳-۱۵. ارتباط بین فرکانس ارتعاشات کششی، با طول پیوند B و مولکول CO یا NO در کمپلکسهای

$(BN)_{n=3-5} \dots NO$ ، $(BN)_{n=3-5} \dots OC$ ، $(BN)_{n=3-5} \dots CO$ و ----- ۶۹

شکل (۳-۱۶). ارتباط بین تعداد مولکول های BN با ممان دو قطبی در کمپلکس های

$(BN)_{n=3-5} \dots ON$ ، $(BN)_{n=3-5} \dots NO$ ، $(BN)_{n=3-5} \dots OC$ ، $(BN)_{n=3-5} \dots CO$ ----- ۷۰

شکل (۳-۱۷). ارتباط بین تعداد مولکول های BN با انرژی برهمکنش در کمپلکس های

$(BN)_{n=3-5} \dots ON$ ، $(BN)_{n=3-5} \dots NO$ ، $(BN)_{n=3-5} \dots OC$ ، $(BN)_{n=3-5} \dots CO$ ----- ۷۳

شکل (۳-۱۸). رابطه بین فاصله $(R_{B \dots C})$ با دانسیته بار $(\rho_{B \dots C})$ در کمپلکس های

$(BN)_{n=3-5} \dots CO$ ----- ۷۶

شکل (۱۹-۳). رابطه بین فاصله $(R_{B...C})$ بالاپلا سین $(\nabla^2 \rho_{B...C})$ در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5...CO}$

۷۷-----

شکل (۲۰-۳). رابطه بین فاصله $(R_{B...O})$ با دانسیته بار $(\rho_{B...O})$ در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5...OC}$

۷۸-----

شکل (۲۱-۳). رابطه بین فاصله $(R_{B...O})$ بالا پلا سین $(\nabla^2 \rho_{B...O})$ در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5...OC}$

۷۹-----

شکل (۲۲-۳). رابطه بین فاصله $(R_{B...N})$ با دانسیته بار $(\rho_{B...N})$ در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5...NO}$

۸۰-----

شکل (۲۳-۳). رابطه بین فاصله $(R_{B...N})$ بالاپلا سین $(\nabla^2 \rho_{B...N})$ در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5...NO}$

۸۱-----

شکل (۲۴-۳). رابطه بین فاصله $(R_{B...O})$ با دانسیته بار $(\rho_{B...O})$ در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5...ON}$

۸۳-----

شکل (۲۵-۳). رابطه بین فاصله $(R_{B...O})$ بالاپلا سین $(\nabla^2 \rho_{B...O})$ در کمپلکس های $(BN)_{n=3-5...ON}$

۸۴-----

شکل (۲۶-۳). برهمکنش های $\pi \rightarrow \pi^*$ و $n \rightarrow n^*$ ، درون مولکولی، خوشه های $(BN)_{n=3-5}$

۸۵

شکل (۲۷-۳). نقاط بحرانی پیوند برای جذب مولکول CO از طریق اکسیژن به نانو خوشه های بور نیتريد

۸۶-----

شکل (۳-۲۷). نقاط بحرانی پیوندبرای جذب مولکول NO از طریق نیتروژن به نانو خوشه های

بور نیتريد ----- ۸۷

شکل (۳-۲۹). نقاط بحرانی پیوندبرای جذب مولکول NO از طریق اکسیژن به نانو خوشه های

بور نیتريد ----- ۸۸

شکل (۳-۳۰). برهمکنش های $\pi \rightarrow \pi^*$ و $n \rightarrow n^*$ ، درون مولکولی، خوشه های $(BN)_{n=3-5}$ ۸۹

فهرست جداول

عنوان	صفحه
جدول (۱-۲). دسته بندی نقاط بحرانی	۴۳
جدول (۱-۳). پارامترهای ساختاری و ممان دو قطبی در نانوخوشه های بورنیتريد خالص	۵۱
	$(BN)_{n=3-5}$
جدول (۲-۳). پارامترهای ساختاری، ممان دو قطبی، فرکانس کششی ارتعاشی و فاصله بين نانوخوشه و مولکول CO در کمپلکس های	۵۴
	$(BN)_{n=3-5} \dots CO$
جدول (۳-۳). پارامترهای ساختاری، ممان دو قطبی، فرکانس کششی ارتعاشی و فاصله بين نانوخوشه و مولکول CO در کمپلکس های	۵۸
	$(BN)_{n=3-5} \dots OC$
جدول (۴-۳). پارامترهای ساختاری، ممان دو قطبی، فرکانس کششی ارتعاشی و فاصله بين نانوخوشه و مولکول NO در کمپلکس های	۶۲
	$(BN)_{n=3-5} \dots NO$
جدول (۵-۳). پارامترهای ساختاری، ممان دو قطبی، فرکانس کششی ارتعاشی و فاصله بين نانوخوشه و مولکول NO در کمپلکس های	۶۶
	$(BN)_{n=3-5} \dots ON$
جدول (۶-۳). انرژی بر همکنش بين نانو خوشه ها و مولکول CO از طریق کربن، در کمپلکس های	۷۱
	$(BN)_{n=3-5} \dots CO$
جدول (۷-۳). انرژی بر همکنش بين نانو خوشه ها و مولکول CO از طریق اکسیژن در کمپلکس های	۷۲
	$(BN)_{n=3-5} \dots OC$

جدول (۸-۳). انرژی بر همکنش بین نانو خوشه ها و مولکول NO از طریق نیتروژن در

کمپلکس های $(BN)_{n=3-5} \dots NO$ ----- ۷۲

جدول (۹-۳). انرژی بر همکنش بین نانو خوشه ها و مولکول NO از طریق اکسیژن در

کمپلکس های $(BN)_{n=3-5} \dots ON$ ----- ۷۳

جدول (۱۰-۳). پارامترهای توپولوژیکال (برحسب $(a.u.)$) برای جذب مولکول CO از طریق

کربن به نانو خوشه های بورنیتريد ----- ۷۵

جدول (۱۱-۳). پارامترهای توپولوژیکال (برحسب $(a.u.)$) برای جذب مولکول CO از طریق

اکسیژن به نانو خوشه های بورنیتريد ----- ۷۸

جدول (۱۲-۳). پارامترهای توپولوژیکال (برحسب $(a.u.)$) برای جذب مولکول NO از طریق

نیتروژن به نانو خوشه های بورنیتريد ----- ۸۰

جدول (۱۳-۳). پارامترهای توپولوژیکال (برحسب $(a.u.)$) برای جذب مولکول NO از طریق

نیتروژن به نانو خوشه های بورنیتريد ----- ۸۲

چکیده

در این پروژه جذب مولکولهای NO و CO بر روی نانو خوشه های بورنیتريدی $(BN)_{n=3-5}$ بررسی شد. نتایج نشان دادند که با افزایش تعداد اتمهای خوشه ها n از ۳ به ۵ فاصله بین مولکولی مولکولهای NO و CO با نانو خوشه ها افزایش می یابد و همچنین انرژی برهمکنش مولکول با نانو خوشه کاهش می یابد. یعنی قویترین برهمکنش بین مولکول با نانو خوشه در $CO \dots (BN)_3$ مشاهده می شود. با افزایش n از ۳ به ۵، طول پیوند B-N در نانو خوشه ها به ترتیب کاهش می یابد. براساس نظریه اتمها در مولکولها (AIM)، چکالی بار الکتریکی در نقاط بحرانی پیوندی بین مولکول با نانو خوشه با افزایش n کاهش می یابد که دلیل بر ضعیف بودن برهمکنش می باشد. می توان نتیجه گرفت که برای واکنش کاتالیستی تجزیه مولکولهای NO و CO، نانو خوشه های $(BN)_3$ مناسب است.