



وزارت علوم، تحقیقات و فناوری



دانشگاه ملایر

دانشکده علوم پایه - گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

مطالعه تئوریکي برهمکنش هالوژن با نانوتیوب بورنفسفید

خالص و دوپ شدن با کربن

به وسیله ی :

عزت السادات دادفر

استاد راهنما :

دکتر مهدی رضایی صامتی

استاد مشاور:

دکتر محمد مرادی

مهر ۱۳۹۲

به نام خدا

مطالعه تئوریکی برهمکنش هالوژن با نانوتیوب بورنفسفید خالص و دوپ شدن

با کربن

به وسیله ی:

عترت السادات دادفر

پایان نامه

ارائه شده به تحصیلات تکمیلی به عنوان بخشی
از فعالیت های لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته ی:

شیمی (گرایش شیمی فیزیک)

از دانشگاه ملایر

ارزیابی و تأیید شده توسط کمیته پایان نامه با درجه:

.....دکتر مهدی رضایی صامتی، دانشیار شیمی فیزیک (استاد راهنما)

.....دکتر محمد مرادی، استادیار شیمی تجزیه (استاد مشاور)

.....دکتر رعده چگل، استادیار فیزیک نانو اپتیک (استاد داور)

.....دکتر علیرضا عبدی کیان، استادیار فیزیک نظری (استاد داور)

.....دکتر مهشید دشتی، استادیار ریاضی کاربردی (نماینده تحصیلات تکمیلی)

مهر ماه ۱۳۹۲

خداوندا

ای، هستی بخش، وجودم بر نعمت بی کرانت توان سگرنیست ذره ذره وجودم برای تو و نزدیک شدن به تومی تند.
ای مراد دکن تادانش اندکم نه زردبانی باشد برای فزونی تکبر و غرور، نه حلقه ای برای اسارت و نه دست یار ای برای تجارت،
بلکه گامی باشد برای تجلیل از تو و متعالی ساختن زندگی خود و دیگران.

تقدیم با بوسه بردستان پدرم:

به او که نمی دانم از بزرگی اش بگویم یا مردانگی، سخاوت، سکوت، مهربانی و...

پدرم راه تمام زندگیت

پدرم دهنوشی، همیشگیست

تقدیم به روح پاک و آسمانی مادر عزیزم، دریای بیکران فداکاری و عشق که وجودم برایش همه رنج بود و خودش برایم همه مهر

تقدیم به استاد کرامی و بزرگوار.

سپاس خدای راکه سخوران، در ستودن او بماند و شمارندگان، شمردن نعمت های او ندانند و کوشندگان حق او را کزاردن نتوانند و سلام و درود بر محمد خاندان پاک او، طاهران معصوم، هم آنان که وجودمان و امدار وجودشان است، و نفرین پیوسته بر دشمنان ایشان تاروزر تا خیزر...

باتقدیر و شکر از استاد فرنیخته و فرزانه جناب آقای دکتر رضایی صامتی که با نکته های دلاویز و گفته های بلند، صحیفه های سخن را علم پدور نمود و همواره راه ما و راه کشای نگرانده در اتمام و اکمال پایان نامه بوده است

بادود فراوان بر روح پاک و آسمانی مادر عزیزم و

سپاس بیکران بر بهدلی و همراهی و بهنگامی پدر بزرگوارم

تقدیر و شکر از عزیزانی که بنده را یاری نمودند.

نام خانوادگی دانشجو: دادفر	نام: عترت السادات
عنوان پایان نامه: مطالعه تئوریکی برهمکنش هالوژن با نانوتیوب بورنفسفید خالص و دوپ شدن با هالوژن	
استاد راهنما: دکتر مهدی رضایی صامتی	
استاد مشاور: دکتر محمد مرادی	
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد	رشته: شیمی
گرایش: شیمی فیزیک	
دانشگاه ملایر-گروه: شیمی	تاریخ فارغ التحصیلی: مهر ۱۳۹۲
تعداد صفحات: ۱۲۷	
کلید واژه: نانوتیوب بورنفسفید، تزریق 3-C، جذب F_2 ، روش DFT، NMR	

چکیده: در این پروژه، جذب F_2 درون و بیرون سطح نانوتیوب بورنفسفید حالت خالص و تزریق شده با سه اتم کربن با استفاده از روش DFT و سطوح $B_3LYP-631G^*(d)$ بررسی شده است. بدین منظور، ابتدا همه ساختارهای آرمیچر (۴و۴)، (۵و۵)، (۶و۶) و زیگزاگ (۶و۰)، (۸و۰)، (۱۰و۰)، (۱۲و۰) توسط دستور فوق اپتیمایز شده است و سپس پارامترهای ساختاری همچون طول پیوند، زاویه پیوند، انرژی پیوند، NMR ، NQR ، اوربیتال هومو و لومو محاسبه شده است. در بخش‌های دیگر ما اثر سه اتم کربن تزریق شده بر روی پارامترهای ساختاری و الکتریکی نانوتیوب بورنفسفید مدل‌های زیگزاگ و آرمیچر مورد مطالعه قرار داده‌ایم. بخش بعدی جذب F_2 درون و بیرون سطح نانوتیوب بورنفسفید خالص و تزریق شده با سه اتم کربن بررسی شده است. و نتایج زیر حاصل گردیده است:

۱) طول پیوند (B-P) که در همسایگی از تزریق قرار دارد کاهش یافته که علت آن است که شعاع اتم کربن نسبت به اتم‌های بور و فسفر کوتاهتر است.

۲) مقادیر CSI با جذب F_2 و تزریق سه اتم کربن کاهش یافته است، زیرا الکترونگاتیویته F_2 و C نسبت به اتم‌های بور بزرگتر است.

۳) گاف انرژی بین اوربیتالهای هومو و لومو در همه مدل‌های زیگزاگ و آرمیچر نانوتیوب بورفسفید با تزریق سه اتم کربن کاهش یافته بنابراین رسانایی الکتریکی نانوتیوب افزایش می‌یابد.

۴) انرژی جذب F_2 روی سطوح نانوتیوب با تزریق سه اتم کربن کاهش یافته بنابراین مدل‌های خالص برای جذب F_2 نسبت به مدل‌های تزریق شده با سه اتم کربن مطلوبتر است.

۵) مقایسه ساختارهای هومو و لومو نشان می‌دهد که تراکم ابر الکترونی بر روی اتم‌های مجاور F_2 و سه اتم کربن تزریق شده متمرکز است چون فلوئور نقش جاذب الکترون را دارد.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	فصل اول - مقدمه
۲.....	مقدمه (فناوری نانو).....
۴.....	عناصر پایه.....
۵.....	روشهای ساخت در فناوری نانو.....
۶.....	خودچینی.....
۶.....	نانولوله.....
۷.....	خواص نانولولهها.....
۸.....	راههای بررسی خواص نانولولههای کربنی.....
۸.....	روشهای تولید نانولولههای کربنی.....
۱۱.....	نانولولههای آلی.....
۱۱.....	نانوساختارهای الگو گرفته از نانولوله.....
۱۲.....	نانولولههای نیتريدبور.....

- ۱۲.....نانوکامپوزیت‌های نانولوله‌ای نیتريدبور.....
- ۱۳.....ویژگی‌های مکانیکی و الکترونیکی.....
- ۱۵.....مروری بر کارهای تحقیقاتی صورت گرفته بر روی نانوتیوب بورفسفید.....
- ۱۷.....اشاره‌ای به دوپینگ کربن بر انواع نانوتیوب.....
- ۱۷.....فلوئور(فلورین).....

فصل دوم- مروری بر تئوری و فرمولهای محاسباتی

- ۲۰.....۱-۲ مقدمه.....
- ۲۱.....۱-۱-۲ تئوری تابعی دانسیته.....
- ۲۲.....۲-۲ تئوری پارامترهای کوانتومی.....
- ۲۵.....۳-۲ تعیین پارامترهای NMR(رزونانس مغناطیس هسته‌ای).....
- ۲۶.....۴-۲ تعیین پارامترهای رزونانس چهار قطبی هسته‌ای.....
- ۲۶.....۵-۲ انرژی جذب.....

فصل سوم- بررسی دوپینگ سه اتم کربن بر نانوتیوب بورفسفید آرمیچر

- ۲۹.....مقدمه.....
- ۲۹.....۱-۳ بررسی پارامترهای ساختاری خالص و تزریق شده حالت (۴و۴)آرمیچر بورفسفید.....

- ۱-۱-۳ تعیین پارامترهای ساختاری بورفسفید (۴و۴) خالص و تزریق شده با کربن.....۲۹
- ۲-۱-۳ تعیین پارامترهای NMR نانوتیوب بورفسفید (۴و۴).....۳۱
- ۳-۱-۳ تعیین پارامترهای NQR برای نانوتیوب بورفسفید حالت آرمیچر (۴و۴).....۳۳
- ۴-۱-۳ ساختارهای هومو و لومو نانوتیوب بورفسفید (۴،۴).....۳۵
- ۵-۱-۳ تعیین ویژگی‌های کوانتومی نانوتیوب بورفسفید آرمیچر (۴و۴) حالت خالص و تزریق شده.....۳۷
- ۲-۳ تعیین پارامترهای بورفسفید آرمیچر (۵و۵) حالت خالص و تزریق شده.....۳۸
- ۱-۲-۳ بررسی پارامترهای ساختاری نانوتیوب بورفسفید (۵و۵) خالص و تزریق شده...۳۸
- ۲-۲-۳ تعیین پارامترهای NMR برای حالت نانوتیوب (۵و۵) خالص و تزریق شده.....۴۰
- ۳-۲-۳ تعیین پارامترهای NQR برای حالت آرمیچر (۵و۵) بورفسفید.....۴۲
- ۴-۲-۳ ساختارهای هومو(الف)-لومو(ب) نانوتیوب بورفسفید (۵و۵) حالت خالص و تزریق شده.....۴۳
- ۵-۲-۳ تعیین ویژگی‌های پارامترهای کوانتومی نانوتیوب بورفسفید (۵و۵).....۴۵
- ۳-۳ بررسی پارامترهای کوانتومی نانوتیوب بورفسفید (۶و۶) خالص و تزریق شده.....۴۶
- ۱-۳-۳ تعیین پارامترهای ساختاری حالت آرمیچر (۶و۶) بورفسفید.....۴۶

۲-۳-۳ تعیین پارامترهای NMR نانوتیوب بورفسفید (۶و۶) آرمیچر..... ۴۸

۳-۳-۳ تعیین پارامترهای NQR نانوتیوب بورفسفید (۶و۶)..... ۵۰

۴-۳-۳ ساختارهای هومو و لومو نانوتیوب بورفسفید (۶،۶)..... ۵۰

۵-۳-۳ تعیین ویژگی پارامترهای کوانتومی نانوتیوب بورفسفید (۶و۶)..... ۵۱

فصل چهارم- بررسی دوپینگ سه اتم کربن برنانوتیوب بورفسفید زیگزاگ

مقدمه..... ۵۴

۱-۴ بررسی پارامترهای ساختاری زیگزاگ (۶و۰) بورفسفید و اثر تزریق شدن..... ۵۴

۱-۱-۴ تعیین پارامترهای ساختاری (طول پیوند و زاویه پیوند)..... ۵۴

۲-۱-۴ تعیین پارامترهای NMR حالت زیگزاگ (۶و۰) بورفسفید..... ۵۶

۳-۱-۴ تعیین پارامترهای NQR حالت (۶و۰) بورفسفید زیگزاگ..... ۵۸

۴-۱-۴ ساختارهای هومو و لومو نانوتیوب بورفسفید (۶و۰)..... ۵۸

۵-۱-۴ تعیین ویژگی پارامترهای کوانتومی نانوتیوب بورفسفید (۶و۰)..... ۶۰

۲-۴ بررسی پارامترهای حالت زیگزاگ بورفسفید (۸و۰) خالص و تزریق شده ۶۱

۱-۲-۴ تعیین پارامترهای ساختاری (طول پیوند و زاویه پیوند)..... ۶۲

- ۶۳.....۲-۲-۴ پارامترهای NMR نانوتیوب بورفسفید (۸ و ۰).....
- ۶۵.....۳-۲-۴ پارامترهای NQR برای حالت زیگزاگ (۸ و ۰) نانوتیوب بورفسفید.....
- ۶۵.....۴-۲-۴ ساختارهای هومو(الف) - لومو(ب) نانوتیوب بورفسفید (۸ و ۰).....
- ۶۷.....۵-۲-۴ تعیین ویژگی پارامترهای کوانتومی نانوتیوب بورفسفید (۸ و ۰).....
- ۶۸.....۳-۴ بررسی پارامترهای حالت نانوتیوب بورفسفید (۱۰ و ۰) و اثر تزریق شدن.....
- ۶۹.....۱-۳-۴ تعیین پارامترهای ساختاری (طول پیوند و زاویه پیوند).....
- ۷۰.....۲-۳-۴ پارامترهای NMR نانوتیوب بورفسفید (۱۰ و ۰) زیگزاگ.....
- ۷۳.....۳-۳-۴ پارامترهای NQR نانوتیوب بورفسفید (۱۰ و ۰).....
- ۷۳.....۴-۳-۴ ساختارهای هومو- لومو نانوتیوب بورفسفید (۱۰ و ۰).....
- ۷۵.....۵-۳-۴ تعیین ویژگی پارامترهای کوانتومی نانوتیوب بورفسفید (۱۰ و ۰) خالص و تزریق شده...۷۵
- ۷۶.....۴-۴ بررسی ساختار نانوتیوب بورفسفید زیگزاگ (۱۲ و ۰).....
- ۷۶.....۱-۴-۴ تعیین پارامترهای ساختاری نانوتیوب بورفسفید (۱۲ و ۰) (طول پیوند و زاویه پیوند).....
- ۷۸.....۲-۴-۴ تعیین پارامتر NMR نانوتیوب بورفسفید (۱۲ و ۰).....
- ۸۱.....۳-۴-۴ تعیین پارامترهای NQR نانوتیوب بورفسفید (۱۲ و ۰).....

۴-۴-۴ ساختارهای هومو- لومو نانوتیوب بورفسفید (۱۲ و ۰)..... ۸۱

۴-۴-۵ بررسی ویژگی پارامترهای کوانتومی نانوتیوب بورفسفید (۱۲ و ۰)..... ۸۲

فصل پنجم- بررسی جذب مولکول فلئور بر نانوتیوب بورفسفید

جذب سطحی..... ۸۵

تفاوت جذب فیزیکی و شیمیایی ۸۵

۱-۵ بررسی پارامترهای ساختاری جذب گاز F_2 بر نانوتیوب بورفسفید آرمیچر (۴ و ۴)..... ۸۹

۱-۱-۵ تعیین پارامترهای ساختاری (طول پیوند و زاویه پیوند)..... ۸۹

۲-۱-۵ تعیین پارامترهای NMR نانوتیوب بورفسفید (۴ و ۴) مدلهای a,b,c,d..... ۹۱

۳-۱-۵ تعیین پارامترهای NQR در حالت آرمیچر (۴ و ۴) بورفسفید..... ۹۸

۴-۱-۵ ساختارهای هومو لومو نانوتیوب بورفسفید (۴، ۴)..... ۹۹

۵-۱-۵ تعیین ویژگی پارامترهای کوانتومی نانوتیوب بورفسفید (۴ و ۴) مدلهای a,b,c,d..... ۱۰۴

۲-۵ بررسی ساختارهای جذب F_2 بر روی حالت زیگزاگ (۸ و ۰) بورفسفید..... ۱۰۸

۱-۲-۵ تعیین پارامترهای ساختاری (طول پیوند و زاویه پیوند) نانوتیوب بورفسفید (۸ و ۰)..... ۱۰۹

۲-۲-۵ تعیین پارامترهای NMR نانوتیوب بورفسفید (۸ و ۰) مدلهای a,b,c,d..... ۱۱۱

۳-۲-۵ تعیین پارامترهای NQR نانوتیوب بورفسفید (۸ و ۰) مدلهای a,b,c,d..... ۱۱۷

۱۱۸.....F₂ با جذب (۸ و ۰) ۴-۲-۵ ساختارهای هومولوگونانوتیوب بورفسفید (۸ و ۰)

۱۲۲.....a,b,c,d مدلهای (۸ و ۰) ۵-۲-۵ تعیین ویژگی پارامترهای کوانتومی نانوتیوب بورفسفید (۸ و ۰)

۱۲۴.....نتیجه گیری

۱۲۵.....منابع و مراجع

فهرست جدولها

صفحه عنوان

فصل اول - مقدمه

جدول ۱-۱: نمایش ساختاری انواع نانوتیوب ۱۰

جدول ۱-۲: نمایش موقعیت فلئور در جدول تناوبی ۱۸

فصل سوم - بررسی دوپینگ سه اتم کربن بر نانوتیوب بورفسفید آرمیچر

جدول ۱-۳: طول وزاویه پیوند نانوتیوب بورفسفید خالص و تزریق شده (۴و۴) ۳۱

جدول ۲-۳: پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{31}p نانوتیوب بورفسفید خالص و تزریق شده

(۴و۴) ۳۳

جدول ۳-۳: پارامترهای NQR هسته‌های ^{11}B نانوتیوب بورفسفید آرمیچر ۳۴

جدول ۴-۳: ویژگی پارامترهای کوانتومی نانوتیوب بورفسفید آرمیچر ۳۸

جدول ۵-۳: طول پیوند وزاویه پیوند نانوتیوب بورفسفید خالص و تزریق شده (۵و۵) ۴۰

جدول ۶-۳: پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{31}p نانوتیوب بورفسفید (۵و۵) ۴۲

جدول ۷-۳: طول پیوند و زاویه پیوند نانوتیوب بورفسفید خالص و تزریق شده (۶و۶) ۴۷

جدول ۳-۸: پارامترهای NMR برای هسته‌های ^{11}B و ^{31}P نانوتیوب بورفسفید (۶ و ۶) ۴۹

فصل چهارم - بررسی دوپینگ سه اتم کربن بر نانوتیوب بورفسفید زیگزاگ

جدول ۴-۱: طول پیوند و زاویه پیوند نانوتیوب بورفسفید خالص و تزریق شده (۶ و ۰) ۵۶

جدول ۴-۲: پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{31}P در نانوتیوب بورفسفید (۶ و ۰) ۵۷

جدول ۴-۳: پارامترهای NQR نانوتیوب بورفسفید زیگزاگ ۵۸

جدول ۴-۴: پارامترهای ویژگی کوانتومی نانوتیوب بورفسفید زیگزاگ ۶۱

جدول ۴-۵: طول پیوند و زاویه پیوند نانوتیوب بورفسفید خالص و تزریق شده (۸ و ۰) ۶۳

جدول ۴-۶: پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{31}P نانوتیوب بورفسفید (۸ و ۰) ۶۴

جدول ۴-۷: طول پیوند و زاویه پیوند نانوتیوب بورفسفید (۱۰ و ۰) ۷۰

جدول ۴-۸: پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{31}P نانوتیوب بورفسفید خالص و تزریق شده

(۱۰ و ۰) ۷۲

جدول ۴-۹: طول پیوند و زاویه پیوند نانوتیوب بورفسفید (۱۲ و ۰) ۷۸

جدول ۴-۱۰: پارامترهای NMR هسته‌های ^{11}B و ^{31}P نانوتیوب بورفسفید (۱۲ و ۰) ۸۰

فصل پنجم - بررسی جذب مولکول فلئور بر نانوتیوب بورفسفید

جدول ۵-۱: طول پیوند و زاویه پیوند نانوتیوب بورفسفید (۴ و ۴) ۹۱

جدول ۲-۵: پارامتر NMR هسته‌های ^{11}B و ^{31}P نانوتیوب بورفسفید (۴و۴) خالص و تزریق شده

مدل (a)..... ۹۳

جدول ۳-۵: پارامتر NMR هسته‌های ^{11}B و ^{31}P نانوتیوب بورفسفید (۴و۴) خالص و تزریق شده

مدل (b)..... ۹۴

جدول ۴-۵: پارامتر NMR هسته‌های ^{11}B و ^{31}P نانوتیوب بورفسفید (۴و۴) خالص و تزریق شده

مدل (c)..... ۹۶

جدول ۵-۵: پارامتر NMR هسته‌های ^{11}B و ^{31}P نانوتیوب بورفسفید (۴و۴) خالص و تزریق شده

مدل (d)..... ۹۷

جدول ۶-۵: پارامترهای NQR هسته ^{11}B نانوتیوب بورفسفید (۴و۴)..... ۹۹

جدول ۷-۵: ویژگی‌های کوانتومی نانوتیوب بورفسفید (۴و۴) خالص و تزریق شده مدل‌های a,b,c,d. ۱۰۷

جدول ۸-۵: طول پیوند و زاویه پیوند نانوتیوب بورفسفید (۸و۰)..... ۱۱۱

جدول ۹-۵: پارامتر NMR هسته‌ها ^{11}B , ^{31}P نانوتیوب بورفسفید (۸و۰) خالص و تزریق شده مدل

(a)..... ۱۱۲

جدول ۱۰-۵: پارامتر NMR هسته ^{11}B , ^{31}P نانوتیوب بورفسفید (۸و۰) خالص و تزریق شده مدل

(b)..... ۱۱۴

جدول ۱۱-۵: پارامتر NMR هسته‌ها ^{11}B , ^{31}P نانوتیوب بورفسفید (۸و۰) خالص و تزریق شده مدل

(c)..... ۱۱۵

جدول ۵-۱۲: پارامتر NMR هسته‌ها ^{31}P , ^{11}B نانوتیوب بورفسفید (۸۰) خالص و تزریق شده

مدل (d)..... ۱۱۶

جدول ۵-۱۳: پارامترهای NQR هسته ^{11}B نانوتیوب بورفسفید (۸۰)..... ۱۱۷

جدول ۵-۱۴: ویژگی‌های کوانتومی نانوتیوب بورفسفید خالص و تزریق شده (۸۰) مدل‌های

a,b,c,d..... ۱۲۴

فهرست شکلها

صفحه	عنوان
	فصل اول - مقدمه
۴.....	شکل ۱-۱: نانوتیوب چند دیواره.....
۶.....	شکل ۱-۲: نمایی از ترکیب C_{60}
۹.....	شکل ۱-۳: مسیر برداری نانوتیوب.....
۱۴.....	شکل ۱-۴: تصویر TEM نانولوله‌های نیتريدبورنی مانند.....
۱۸.....	شکل ۱-۵: ساختار کریستالی فلئور آلفا.....
فصل سوم - بررسی دوپینگ سه اتم کربن بر نانوتیوب بورفسفید آرمیچر	
۳۰.....	شکل ۳-۱: ساختار ایت شده نانوتیوب بورفسفید (۴و۴).....
۳۵.....	شکل ۳-۲: ساختارهای هومو(الف) - لومو(ب) نانوتیوب بورفسفید (۴،۴) حالت خالص.....
۳۶.....	شکل ۳-۳: ساختارهای هومو(الف) - لومو(ب) نانوتیوب بورفسفید (۴،۴) حالت تزریق شده.....
۳۹.....	شکل ۳-۴: ساختار ایت شده نانوتیوب بورفسفید (۵و۵).....
۴۴.....	شکل ۳-۵: ساختارهای هومو(الف) - لومو(ب) نانوتیوب بورفسفید (۵و۵) حالت خالص.....