

عنوان مقاله:

مطالعه نظری ساختار و انرژی نانوخوشه های کوچک نیتريدبور به روش نظریه تابعی چگالی

محل انتشار:

اولین کنفرانس ملی علوم و فناوری نانو (سال: 1389)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

محمد بیگدلی تبار - دانشگاه آزاد اسلامی واحد اسلامشهر، دانشکده علوم پایه گروه فیزیک

ضرغام باقری - دانشگاه آزاد اسلامی واحد اسلامشهر، دانشکده علوم پایه گروه فیزیک

مهدی اسرافیلی - تهران دانشگاه تربیت مدرس گروه شیمی

ناصر هادیپور - تهران دانشگاه تربیت مدرس گروه شیمی

خلاصه مقاله:

خوشه های کوچک نیتريد بور را براساس محاسبات نظریه تابعی چگالی از نظر ساختارهای هندسی ممکن و تغییرات انرژی برحسب تغییر تعداد هریک از اتمهای بور و نیتروژن بررسی کردیم. ساختار بهینه برای خوشه های کوچک تا B8N8 را به دست آورده و انرژی خوشه ها انرژی پیوندی، و گاف انرژی آنها را محاسبه و مورد کنکاش قرار دادیم، از نتایج این تحقیق می توان در مطالعه خواص مقیاس نانو این ترکیب استفاده کرد.

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/103616>

