سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
نگرش نظری بر تاثیر حلقه بورازین در پیش بینی ویژگیهای ایزومرهای ظرفیت C36

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

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:
رضا غیاثی - *گروه شیمی دانشکده علوم پایه دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شرق قیامد*

سمانه صادق بیگی - *گروه شیمی دانشکده علوم پایه دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهر ری*

خلاصه مقاله:
ویژگیهای ساختاری و الکترونی مولکول C30B3N3 و ایزومرهای ظرفیت ان با استفاده از نظریه تابعگان چگالی DFT بررسی گردیده و نتیجه ها نشان میدهند که حالت پایه سه تایی ایزومر g دارای کمترین سطح انرژی در مقایسه با ایزومرهای دیگر می باشد حالت پایه یکتایی ایزومرهای a,g هم انرژی به شمار می ایند دراین مقاله اختلاف سطح انرژی و مقدارها NICS برای تمامی ایزومرها به دست آورده شده و چگونگی همبستگی سطح انرژی NICS، و اختلاف شکاف HOMO-LUMO ارایه گردیده است.

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/103909