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

عنوان مقاله:

بررسی نظری خواص ساختاری و الکترونی نانو ساختار B(12)N(12) در جذب نیکل (Ni) به روش نظریه تابع چگالی در سطح تئوری B3LYP/6-31G

محل انتشار:

هفتمین کنفرانس بین المللی شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسنده:

رحیم اسم خانی - *استادیار ، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی، واحد خوی،دانشگاه آزاد اسلامی، خوی، ایران*

خلاصه مقاله:

در پژوهش حاضر، اثر جذب سطحی نیکل (Ni) در موضع های مختلف بر روی نانو ساختار B(12)N(12) بااستفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی شد. در این مطالعه به ارزیابی شاخص های مربوط به فعالیت شیمیاییمولکول B(12)N(12) وکمپلکس Ni@B(12)N(12) پرداخته شد. مقادیر انرژی هوموHOMO)، انرژی لومو (LUMO)،انرژی گپ (E(gap))، سختی شیمیایی (η)، پتانسیل شیمیایی (μ)، ضریب الکتروفیلیسیته (ω)،الکترون افینیتی (EA) محاسبه شدند. محاسبات این پژوهش با استفاده از روش تئوری تابعی چگالی (DFT) در سطح نظریB3LYP/6–31G و با استفاده از نرم افزار گوسین 90 انجام شده است. با توجه به نتایج به دست آمده ، پایدارترینحالت برهمکنش اتم Ni با نانو ساختارB(12)N(12) نزدیکی از سمت حلقه شش ضلعی می باشد.با توجه به بررسیپارامترهای فعالیت شیمیایی ، انرژی کل کمپلکس های Ni@B(12)N(12) نسبت به B(12)N(12) پایین بوده و پایدار ترند.سختی شیمیایی (η) وپتانسیل شیمیایی (μ) ، با استحکام و واکنش پذیری و فعالیت شیمیایی رابطه دارند، لذاکمپلکس های Ni@B(12)N(12) با توجه به پایین بودن سختی شیمیایی وبالا بودن پتانسیل شیمیایی ، ازفعالیتشیمیایی بالایی برخوردار است.ضریب الکتروفیلیسیته (ω) و الکترون افینیتی (EA) بالای Ni@B(12)N(12)، نشاندهنده تمایل زیاد به جذب الکترون این مولکول ها می باشد.

کلمات کلیدی:

B(12)N(12)؛Ni@B(12)N(12)، جذب نیکل، خواص ساختاری و الکترونی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1040727