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

عنوان مقاله:
مطالعه ساختاری نانولوله بور- نیتریدی با محاسبه پارامترهای NMR به روش نظریه تابعی چگالی DFT

محل انتشار:
ششمین همایش سراسری علوم پایه (سال: 1386)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:
اسدالله بشرا - *گروه شیمی فی*

احمد سیف - *گروه شیمی فی*

محمود میرزائی - *گروه شیمی فیزیک، بخش شیمی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران ، ایران، باشگاه پ*

خلاصه مقاله:
مدلی از نانو بور- نیترید 4،4 به عنوان نماینده ای از نانو لوله های از نوع صندلی راحتی مورد مطالعه قرار گرفته است. ابتدا ساختار مورد نظر بهینه سازی شد و سپس پارامترهای تشدید مغناطیس هسته NMR در سطح هسته های 11B و 15N به روش نظریه تابعی چگالی محاسبه گردیدند. بررسی پارامترهای محاسبه شده در لایه های مختلف هسته ای حکایت از ناهمگن بودن محیط الکترواستاتیکی در طول نانو لوله و به ویژه در لبه ها قرار دارد در حالی که هسته های موجود در یک لایه محیط الکترواستاتیکی یکسانی را احساس می کنند. کلیه محاسبات با استفاده از نرم افزار Gaussian 98w نجام گرفتند.

کلمات کلیدی:
نانولوله- نیترید- نظریه تابعی چگالی NMR DFT

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/161968