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

عنوان مقاله:
مطالعه ساختار و ویژگی های الکترونی نانوغنچه های نانو لوله کربنی

محل انتشار:
دومین همایش ملی فناوری نانو از تئوری تا کاربرد (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:
فاطمه منتظر - *دانشجو، دانشگاه آزاد اسلامی واحد قائمشهر ساختمان شیمی*

مسعود درویش گنجی - *استادیار، دانشگاه آزاد اسلامی واحد قائمشهر ساختمان شیمی*

مجید مرادیان

خلاصه مقاله:
نانولوله های کربنی عاملدار شده با فولرین (نانوغنچه های کربنی) طبقه تازه ای از مواد هیبرید کربنی را شکل می دهند که در مقایسه با اجزاء اولیه، از ویژگی های قابل توجهی برخوردار هستند. این نانو ساختار هیبرید کربنی(کربن نانوغنچه) شامل یک فولرین است که از نظر کووالانسی با یک کربن نانولوله تک جداره پیوند خورده است. نانوغنچه های کربنی راه جدیدی را برای به کارگیری نانولوله ها می گشایند. خصوصًا به علت واکنش پذیری بالای فلورین ها که احتمال تنظیم بهتر این ماده از طریق تغییرات شیمیایی را مطرح می کند. در این تحقیق جذب فولرین C60 بر روی نانولوله های کربنی تک جداره با کایرالیتی (6.6) و همچنین میزان انتقال بار مولیکن در این ساختار ارزیابی میشود. پس از بهینه سازی ساختار نانولوله ی عاملدار شده با فولرین با استفاده از محاسبات کوانتمی DFT میزان جذب نانوغنچه های کربنی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج بدست آمده نشان می دهد فولرین از طریق پیوند کربن-کربن بین حلقه شش ضلعی- شش ضلعی بر روی پیوند کربن-کربن زیگزاگ نانولوله قرار می گیرد. انرژی جذب 1/05- الکترون ولت بیانگر جذب شیمیایی قوی در پایدارترین پیکربندی فولرین C60 - نانولوله (6.6) میباشد. نتایج حاصل از آنالیز بار مولیکن نیز نشان دهنده انتقال الکترون از فولرین به نانولوله می باشد. برای وضوح بیشتر ساختار الکترونی، به بررسی دانسیته موضعی (DOS) و نمودار چگالی حالت ها پرداخته شد، که در این پیکربندی وجود پیک در سطح فرمی این نمودار و عدم وجود گپ انرژی بیانگر رسانایی سیستم است. و میزان انتقال بار آن 0/03 + الکترون می باشد، که نشان دهنده یک برهمکنش پیوندی قوی بین فولرین و نانولوله (6.6) می باشد.

کلمات کلیدی:
فولرین C60،نانوغنچه، مولیکن،DFT،ساختار الکترونی، دانسیته موضعی DOS

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/289110