

## مطالعه برهمکنش منوترپن‌های خطی با نانو ذره بورنیتريد ( $B_{12}N_{12}$ )

اسماعیل وصالی\*<sup>+</sup>، زهرا امیرزاده، خدیجه دیده‌بان

تهران، دانشگاه پیام نور، گروه شیمی

**چکیده:** ترین‌ها بیش‌تر در گیاهان به عنوان جزء اصلی روغن‌های ضروری (اسانس) می‌باشند. در این کار پژوهشی برهمکنش منوترپن‌های خطی با نانوذره فولرن بورنیتريد ( $B_{12}N_{12}$ ) بررسی شد. منوترپن‌های خطی مورد مطالعه میرسن، ژرانیول، ژرانیال و نرال است. محاسبه‌های کوانتومی روی ساختار منوترپن‌های خطی انجام شد و نوع جذب و جایگاه های جذب منوترپن‌های خطی روی نانو فولرن بورنیتريد  $B_{12}N_{12}$  بررسی شد. انرژی جذب، انرژی انسجام، انرژی بالاترین اوربیتال ملکولی اشغال شده (HOMO) و پایین‌ترین اوربیتال ملکولی اشغال نشده (LUMO) برای برهمکنش منوترپن‌های خطی با نانو ذره بورنیتريد محاسبه شد.

**واژه‌های کلیدی:** منوترپن خطی؛  $B_{12}N_{12}$ ؛ بورنیتريد؛ محاسبات تئوری؛ نرم افزار ارگوسین.

**KEYWORDS:** : Linear mono terpenes;  $B_{12}N_{12}$ ; Boron nitride; Theoretical calculations; Gaussian software.

### مقدمه

به کمک پرتوسنجی فروسرخ (IR) معلوم شد که منوترپنوئیدهای طبیعی خطی به تقریب همه به صورت ایزوپروپیلیدین هستند. منوترپنوئیدها در صنایع عطرسازی، غذایی و دارویی استفاده می‌شوند. و بسیاری از آن‌ها ویژگی‌های زیستی از خود نشان می‌دهند. ترپنوئیدها را می‌توان از قسمت‌هایی از گیاه که با هوا خشک شده و سپس پودر شده‌اند با استفاده از سوکسله با حلال‌هایی مانند پترولیوم اتر، بنزن، دی اتیل اتر، کلروفرم، اتیل استات، استن، اتانول، متانول و آب که قطبیت آن‌ها به ترتیب افزایش می‌یابد استخراج کرد [۲]. کشف سریع ترپنوئیدهای جدید در دهه‌های اخیر

منوترپنوئیدها (ترکیب‌های ده کربنه) از ترکیب دو واحد ایزوپرن<sup>(۱)</sup> به دست می‌آیند. این ترکیب‌ها در اثر اتصال سر به دم دو واحد ایزوپرن به دست می‌آیند و با اسکلت ۲ و ۶-دی متیل اکتان نمایش داده می‌شوند. ایزوپرن به فرمول ملکولی  $C_5H_8$  مایعی فرار است که در ۳۴ درجه سلسیوس می‌جوشد. نام شیمیایی این ترکیب، ۲-متیل - ۱ - بوتادی ان است. البته این ماده به حالت آزاد در اسانس‌ها وجود ندارد. ولی در عین حال سازنده اصلی تمام ترپن‌ها می‌باشد [۱]. ایزوپرن در تولید زیستی ترپنوئیدها دخالت ندارد، بلکه مشتق‌های آن در این پدیده دخیل می‌باشند.

\*عجده دار مکاتبات

+E-mail: vesally@yahoo.com

(۱) Isoprene

## بخش نظری

## روش‌های محاسباتی

ابتدا محاسبه‌ها روی ساختار چهار مونو ترپن خطی ژرانیول<sup>(۳)</sup>، میرسن<sup>(۴)</sup>، ژرانیال<sup>(۵)</sup>، نرال<sup>(۶)</sup> و همچنین نانو فولرن  $B_{12}N_{12}$  انجام شد و ساختار بهینه آن‌ها به دست آمد. سپس هر یک از این مونو ترپن‌ها از جهت‌های گوناگون با نانو فولرن بور نیتريد برهمکنش داده و انرژی جذب با استفاده از معادله زیر به دست آمد

$$E_{\text{ads}} = E_{B_{12}N_{12}-MT} - (E_{B_{12}N_{12}} + E_{MT}) \quad (1)$$

به طوری که

$E_{\text{ads}}$ : انرژی جذب

$E_{B_{12}N_{12}-MT}$ : انرژی کل برهمکنش نانو فولرن بور نیتريد

با مونوترپن خطی

$E_{B_{12}N_{12}}$ : انرژی ساختاری ملکول بور نیتريد

$E_{MT}$ : انرژی ساختاری ملکول مونو ترپن خطی

سپس انرژی جذب هر یک از کمپلکس‌ها مورد بررسی قرار گرفت و از مقایسه آن‌ها این نتیجه به دست آمد که مونوترپنی با ملکول  $B_{12}N_{12}$  برهمکنش شدیدتری دارد که مقدار انرژی جذب کمپلکس آن با بورنیتريد منفی‌تر باشد.

تمام محاسبه‌ها در این پژوهش با استفاده از روش نظریه تابعی دانسیته<sup>(۷)</sup> و در سطح نظری  $B3LYP/6-31G^*$  و همچنین با استفاده از نرم افزار گوسین ۰۹ انجام شد. در این مطالعه به ارزیابی برخی شاخص‌های واکنش که ممکن است برای تجزیه و تحلیل برهمکنش‌های ملکولی مفید باشند پرداخته شد. این شاخص‌ها شامل انرژی مطلق (انرژی ساختاری)، انرژی انسجام، انرژی پایداری (انرژی جذب) انرژی هومو، انرژی لومو و انرژی شکاف (سختی) می‌باشد. انرژی مطلق همان انرژی تشکیل ساختار است که هر چه این انرژی منفی‌تر باشد ساختار پایدارتر است و این انرژی در انتهای فایل خروجی بهینه شده قرار دارد [۱۵]. انرژی انسجام از تفاوت انرژی مطلق ساختار بهینه با مجموع انرژی تک تک اتم‌های آن ساختار به دست می‌آید. انرژی پایداری (جذب) از تفاوت انرژی مطلق ساختار بهینه کمپلکس با مجموع انرژی مطلق مونومرهای تشکیل دهنده آن کمپلکس

نیازمند به کارگیری فناوری‌های جدید جداسازی و اسپکتروسکوپی بوده‌است. کاربرد فناوری رزونانس مغناطیسی هسته (NMR) دوبعدی، کمک ویژه‌ای در تعیین ساختار ترپنوئیدهای جدید نموده است. داده‌های طیفی و اطلاعات فیزیکی موجود در منابع علمی گوناگون کمک شایانی در تعیین ساختار ترپنوئیدهای جدید می‌نماید. اطلاعاتی مانند نقطه‌های ذوب و جوش، فرمول ملکولی و چرخش نوری و استفاده از یافته‌های کامپیوتری در مورد ترپنوئیدها، در شناسایی و تعیین ساختار دقیق ترپنوئیدها بسیار مؤثر است. امروزه استفاده از فناوری پیشرفته GC/MS (شامل دو دستگاه کروماتوگرافی گازی و اسپکتروسکوپی جرمی که با هم جفت شده‌اند) شناسایی ترپنوئیدهای موجود در گیاهان را آسان کرده است [۱]. ترکیب‌های نانوذره‌های کربنی و مشتق‌های دوپ شده آن‌ها از اهمیت بالایی برخوردارند [۳]. نانو ساختارهای BN دارای طیف گسترده‌ای از ویژگی‌های جذاب مانند ثبات و استحکام در دمای بالا، ثابت دی الکتریک کم، رسانایی حرارتی بزرگ و مقاومت در برابر اکسایش می‌باشد. که این منجر به تعدادی از کاربردهای بالقوه آن به عنوان مواد الکترونیکی می‌شود [۴]. فولر<sup>(۱)</sup> و همکاران در سال ۱۹۹۷ میلادی [۵] نشان داده‌اند که  $N_{12}B_{12}$  به عنوان فولرن بور نیتريد مهمی است که به نظر می‌رسد نسبت به دیگر ترکیب‌های پایدارتر می‌باشد. اوکو<sup>(۲)</sup> و همکاران در سال ۲۰۰۴ میلادی [۶]، کلاستر  $B_{12}N_{12}$  را تهیه کرده‌اند و آن را با پرتوسنجی جرمی زمان پرواز شرح داده‌اند. نشان داده شد که کلاستر  $B_{12}N_{12}$  مطلوب و ارجح، دارای ساختار براساس آرایش هشت وجهی می‌باشد که تمام رأس‌های بور و همچنین رأس‌های نیتروژن هم ظرفیت‌اند [۸، ۷]. این خوشه‌ها از حلقه‌های چهار و شش عضوی BN تشکیل شده است. بایی و همکاران در سال ۲۰۱۲ میلادی جذب  $CO_2$  با استفاده از فناوری DFT بر روی نانو قفس BN را بررسی نموده‌اند [۹]. در ادامه پژوهش‌ها، جذب و حذف مولکول‌ها و ذره‌های گوناگون روی نانوذره‌ها از اهمیت ویژه برخوردار شد و مقاله‌های فراوانی در این زمینه چاپ شد [۱۴-۱۰]، در این پژوهش برهمکنش فولرن و مونوترپن‌های خطی مورد نظر مطالعه شد.

(۱) Fowler

(۲) Oku

(۳) Geraniol

(۴) Myrcene

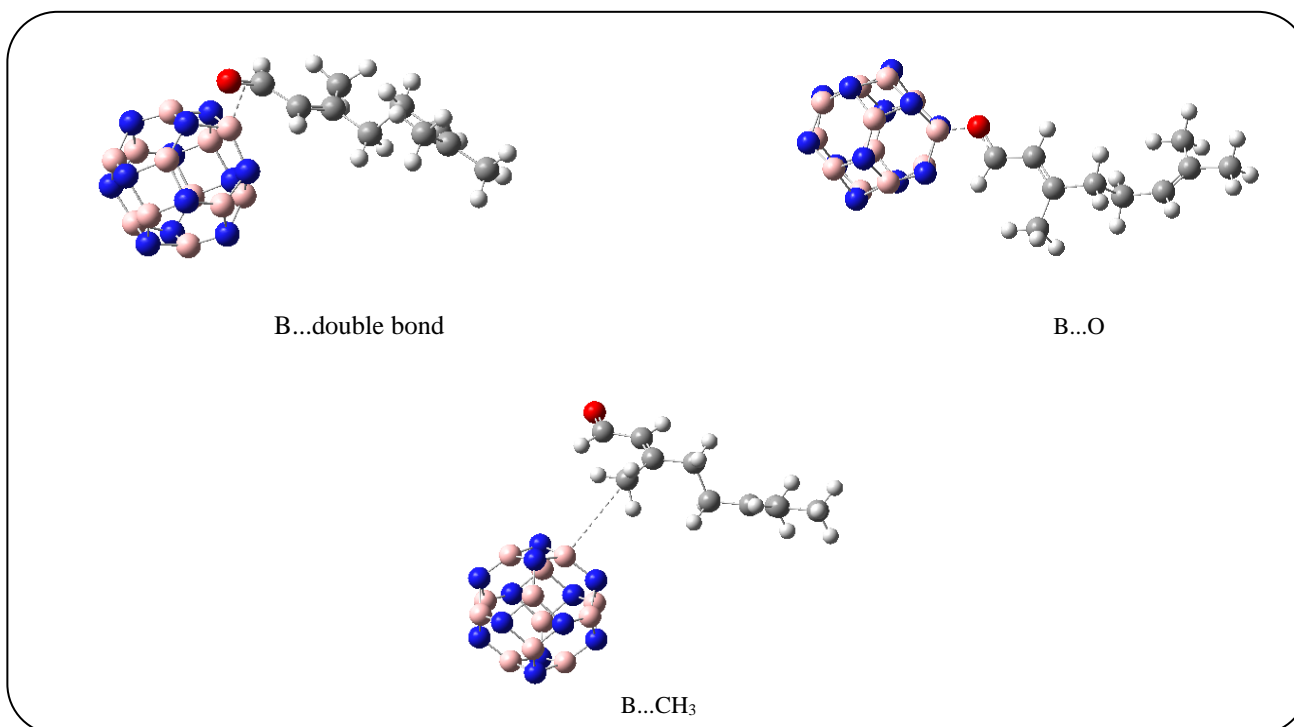
(۵) Geranial

(۶) Neral

(۷) Density functional theory

جدول ۱- انرژی مطلق، انرژی جذب و طول پیوند ساختارهای بهینه شده ی شکل ۱.

نانو ساختار	E <sub>T</sub> (H)	E <sub>S</sub> (H)	E <sub>S</sub> (kJ/mol)	طول پیوند(Å)
B...O	-۱۴۲۲٫۰۴	-۰٫۰۳۶	-۹۵٫۳۱	۱٫۵۸
B...double bond	-۱۴۲۲٫۰۴	-۰٫۰۳۲	-۸۴٫۸۵	۱٫۶۳
B...CH <sub>۳</sub>	-۱۴۲۲٫۰۴	۰٫۰۰۰	-۰٫۸۴	۳٫۶۳



شکل ۱- ساختارهای بهینه شده ی کمپلکس‌ها در اثر برهمکنش ژرانیال با نانو ذره بورنیتريد.

ژرانیال با نانو ذره بورنیتريد را نشان می‌دهد. انرژی مطلق، انرژی پایداري (انرژی جذب) و طول پیوند ساختارهای بهینه شده ی برهمکنش ژرانیال با نانو ذره بور نیتريد در جدول ۱ گردآوری شده‌اند.

با توجه به جدول ۱ انرژی مطلق در برهمکنش اتم بور با اتم اکسیژن منفی تر از برهمکنش اتم بور با پیوند دوگانه و گروه متیل است. پس برهمکنش اول پایدارتر می‌باشد. همچنین انرژی پایداري یا انرژی جذب نیز منفی تر بوده که این نشان دهنده قوی‌ترین برهمکنش است. بنابراین کمپلکس اول پایدارتر از دو کمپلکس دیگر می‌باشد. نتیجه‌های محاسبه ی انرژی هومو، لومو و انرژی شکاف (E<sub>g</sub>) ساختارهای بهینه شده ی شکل ۱ در جدول ۲ نشان داده شد.

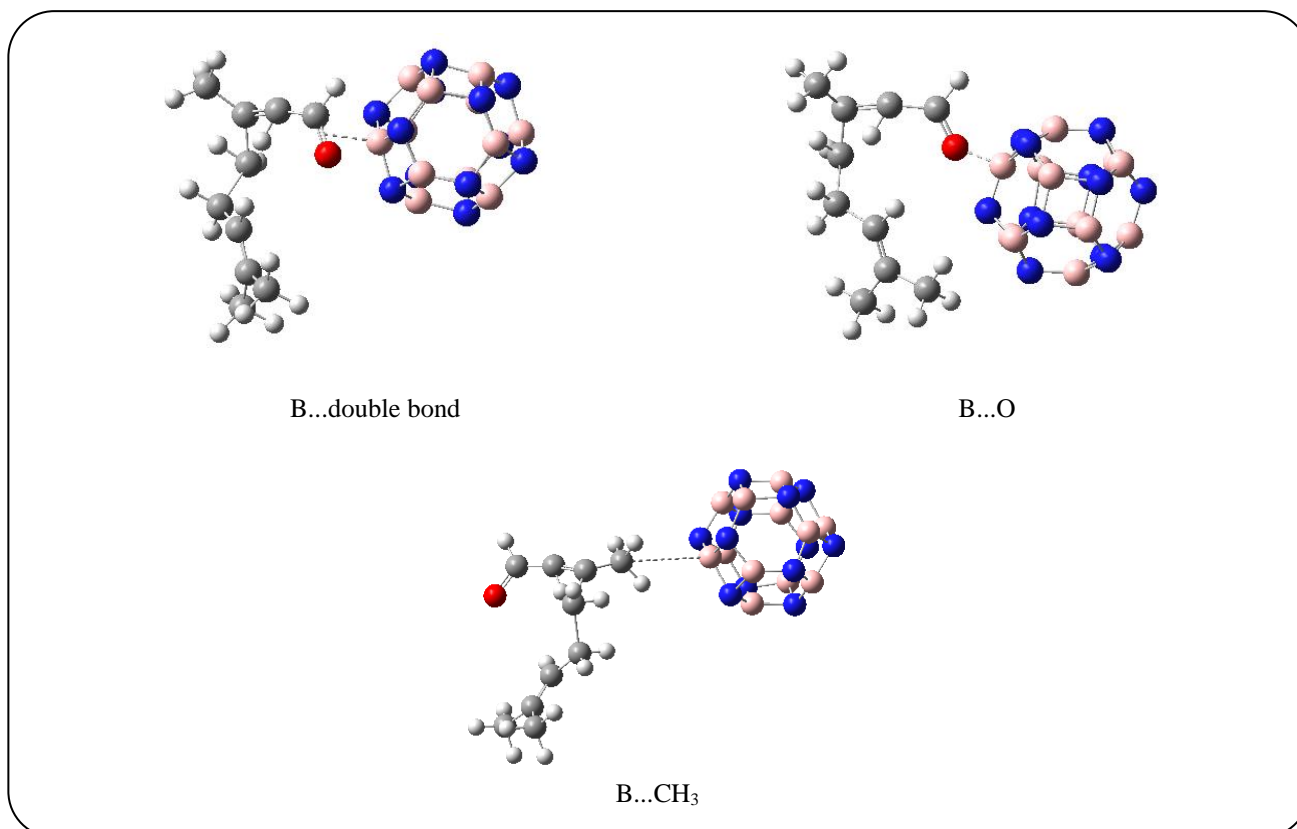
به دست می‌آید. انرژی هومو انرژی بالاترین اوربیتال ملکولی اشغال شده و انرژی لومو انرژی پایین ترین اوربیتال ملکولی اشغال نشده می‌باشد [۱۵]. سختی یا انرژی شکاف از تفاضل انرژی هومو و لومو هریک از ساختارها به دست آمده است.

### نتیجه‌ها و بحث

به منظور بررسی برهمکنش مونوترپن‌های خطی با نانوفولرن بورنیتريد محاسبه‌ها با استفاده از روش B3LYP و مجموعه پایه ۶-۳۱G\* انجام شد. برای یافتن شدیدترین برهمکنش بین مونوترپن‌های خطی و نانو فولرن بورنیتريد ساختار چندین کمپلکس از این دو بررسی شد. شکل ۱ ساختارهای بهینه شده ی کمپلکس‌ها در اثر برهمکنش

جدول ۲- انرژی هومو، لومو و انرژی شکاف (Eg) ساختارهای بهینه شده شکل ۱.

نانو ساختار	$E_{HOMO}(H)$	$E_{HOMO}(eV)$	$E_{LUMO}(H)$	$E_{LUMO}(eV)$	$\varepsilon L-\varepsilon H=\eta(H)$	$\varepsilon L-\varepsilon H=\eta(eV)$
B...O	-۰٫۲۳۶	-۶٫۴۲۲	-۰٫۱۲۰	-۳٫۲۶۵	۰٫۱۱۶	۳٫۱۵۷
B...double bond	-۰٫۱۳۶	-۳٫۷۰۰	-۰٫۰۵۲	-۱٫۴۱۵	۰٫۰۸۴	۲٫۲۸۵
B...CH <sub>3</sub>	-۰٫۱۳۹	-۳٫۷۸۲	-۰٫۰۴۰	-۱٫۰۸۸	۰٫۰۹۰	۲٫۶۹۴



شکل ۲- ساختارهای بهینه شده‌ی کمپلکس‌ها در اثر برهمکنش نرال با نانو ذره بورنیتريد.

در برهمکنش اتم بور با اتم اکسیژن کمتر از برهمکنش اتم بور با پیوند دوگانه و گروه متیل است. نتیجه کلی که از مقایسه‌ی جدول‌های ۱ با ۳ می‌توان داشت این است که انرژی جذب برهمکنش نانو ذره بور نیتريد با نرال نسبت به برهمکنش نانو ذره بور نیتريد با ژرانیال کمی منفی‌تر بوده پس کمپلکس به دست آمده از مونوترین خطی نرال کمی پایدارتر است.

شکل ۳ ساختارهای بهینه شده‌ی کمپلکس‌ها در اثر برهمکنش میرسن با نانو ذره بورنیتريد را نشان می‌دهد.

با توجه به جدول‌های ۵ و ۶ انرژی مطلق در برهمکنش بین اتم بور با پیوند دوگانه منفی‌تر از برهمکنش بین اتم بور با گروه متیل است.

با توجه به جدول ۲ اختلاف سطح انرژی هومو و لومو یا انرژی شکاف در برهمکنش بین اتم بور با اتم اکسیژن کم‌تر از برهمکنش اتم بور با پیوند دوگانه و گروه متیل است. شکل ۲ ساختارهای بهینه شده‌ی کمپلکس‌ها در اثر برهمکنش نرال با نانو ذره بورنیتريد را نشان می‌دهد.

با توجه به جدول‌های ۳ و ۴ انرژی مطلق در برهمکنش بین اتم بور با اتم اکسیژن منفی‌تر از برهمکنش بین اتم بور با پیوند دوگانه و گروه متیل است. پس برهمکنش اول پایدارتر می‌باشد. همچنین انرژی پایداری یا انرژی جذب نیز منفی‌تر بوده که این نشان دهنده برهمکنش قوی‌تری می‌باشد. اختلاف سطح انرژی هومو و لومو

جدول ۳- انرژی مطلق، انرژی جذب و طول پیوند ساختارهای بهینه شده‌ی شکل ۲.

نانو ساختار	E <sub>r</sub> (H)	E <sub>s</sub> (H)	E <sub>s</sub> (kJ/mol)	طول پیوند (Å)
B...O	-۱۴۲۲٫۰۷	-۰٫۰۳۶	-۹۵٫۴۴	۱٫۶۴
B...double bond	-۱۴۲۲٫۰۷	-۰٫۰۲۸	-۷۴٫۸۱	۱٫۷۸
B...CH <sub>۳</sub>	-۱۴۲۲٫۰۶	۰٫۰۰۰	-۰٫۲۶	۳٫۹۲

جدول ۴- انرژی هومو، لومو و انرژی شکاف (E<sub>g</sub>) ساختارهای بهینه شده شکل ۲.

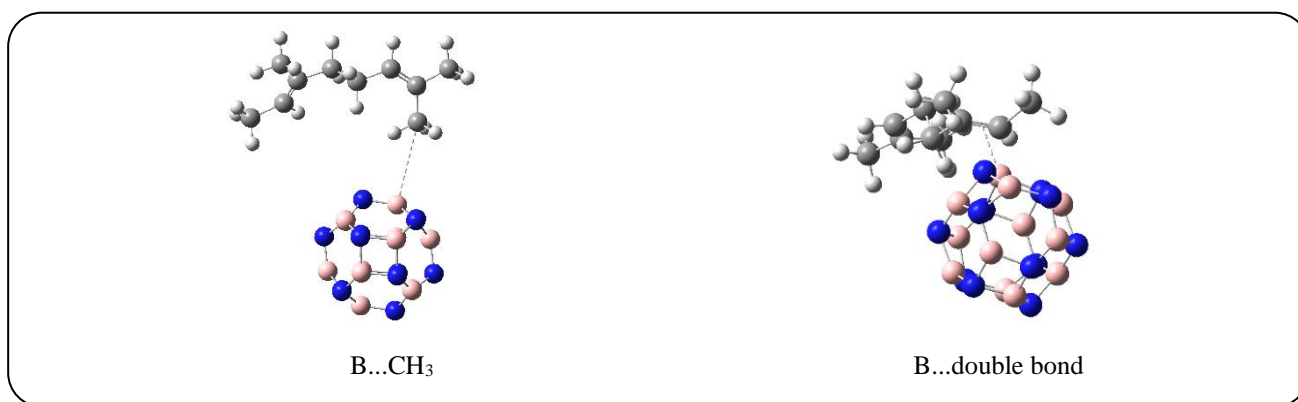
نانو ساختار	E <sub>HOMO</sub> (H)	E <sub>HOMO</sub> (eV)	E <sub>LUMO</sub> (H)	E <sub>LUMO</sub> (eV)	η(H) = εL-εH	η(eV) = εL-εH
B...O	-۰٫۲۳۸	-۶٫۴۷۶	-۰٫۱۲۰	-۳٫۲۶۵	۰٫۱۱۸	۳٫۲۱۱
B...double bond	-۰٫۱۵۸	-۴٫۲۹۹	۰٫۰۵۵	۱٫۴۹۶	۰٫۲۱۳	۵٫۷۹۶
B...CH <sub>۳</sub>	-۰٫۱۹۲	-۵٫۲۲۴	۰٫۰۷۳	۱٫۹۸۶	۰٫۲۶۵	۷٫۲۱۱

جدول ۵- انرژی مطلق، انرژی جذب و طول پیوند ساختارهای بهینه شده ی شکل ۳.

نانو ساختار	E <sub>r</sub> (H)	E <sub>s</sub> (H)	E <sub>s</sub> (kJ/mol)	طول پیوند (Å)
B...double bond	-۱۳۴۸٫۰۳	-۰٫۰۰۵	-۱۲٫۰۵	۲٫۱۳
B...CH <sub>۳</sub>	-۱۳۴۸٫۰۳	۰٫۰۰۰	-۰٫۵۲	۳٫۵۶

جدول ۶- انرژی هومو، لومو و انرژی شکاف (E<sub>g</sub>) ساختارهای بهینه شده شکل ۳.

Nano structure	E <sub>HOMO</sub> (H)	E <sub>HOMO</sub> (eV)	E <sub>LUMO</sub> (H)	E <sub>LUMO</sub> (eV)	η(H) = εL-εH	η(eV) = εL-εH
B...double bond	-۰٫۲۲۶	-۶٫۱۵۰	-۰٫۰۲۴	-۰٫۶۵۳	۰٫۲۰۲	۵٫۴۹۷
B...CH <sub>۳</sub>	-۰٫۱۶۴	-۴٫۴۶۲	۰٫۰۴۷	۱٫۲۷۸	۰٫۲۱۱	۵٫۷۴۱



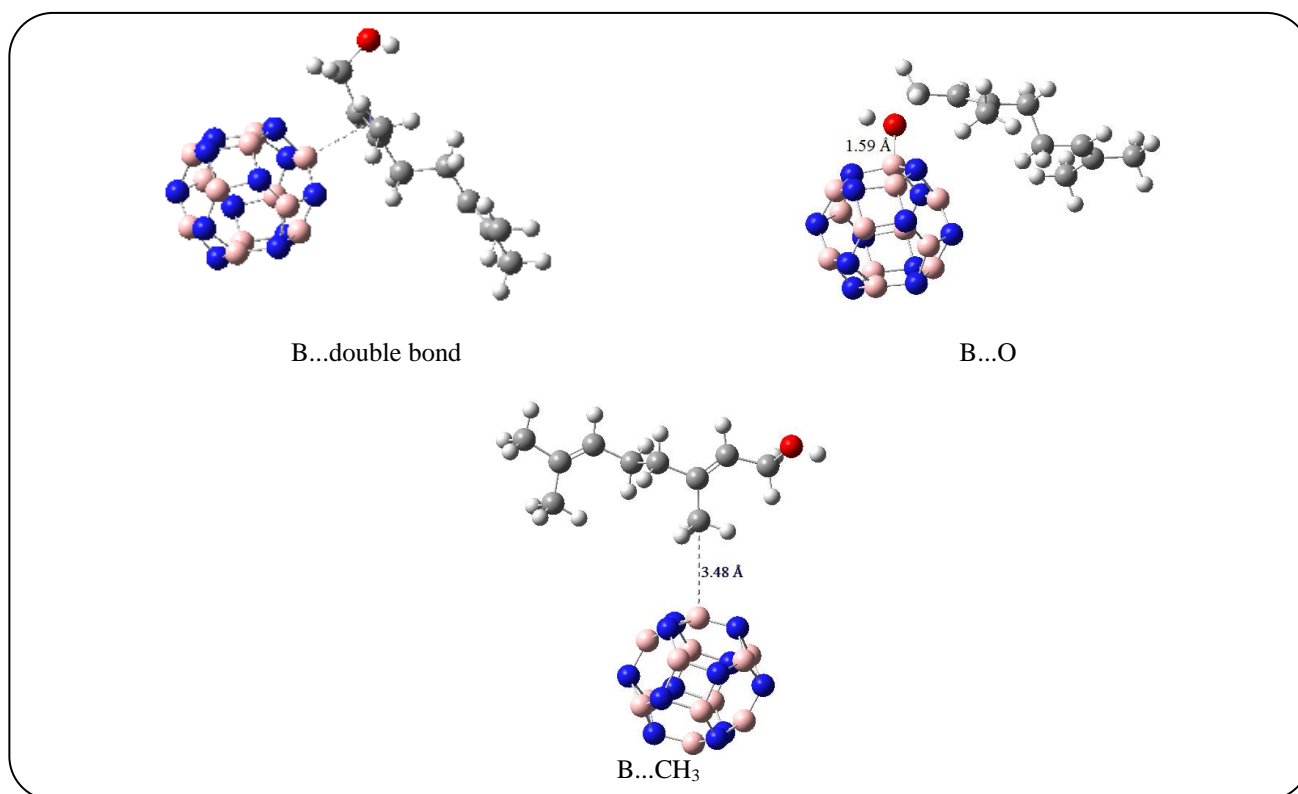
شکل ۳- ساختارهای بهینه شده‌ی کمپلکس‌ها در اثر برهمکنش میرسن با نانو ذره بورنیتريد.

جدول ۷- انرژی مطلق، انرژی جذب و طول پیوند ساختارهای بهینه شده ی شکل ۴.

نانو ساختار	$E_T(H)$	$E_S(H)$	$E_S(kj/mol)$	طول پیوند(Å)
B...O	-۱۴۲۳/۲۶	-۰/۰۳۳	-۸۶/۷۸	۱/۵۹
B...double bond	-۱۴۲۳/۲۵	-۰/۰۲۲	-۰/۰۲۲	۲/۴۳
B...CH <sub>۳</sub>	-۱۴۲۳/۲۴	۰/۰۰۰	-۱/۱۳	۳/۴۸

جدول ۸- انرژی هومو، لومو و انرژی شکاف (E<sub>g</sub>) ساختارهای بهینه شده شکل ۴.

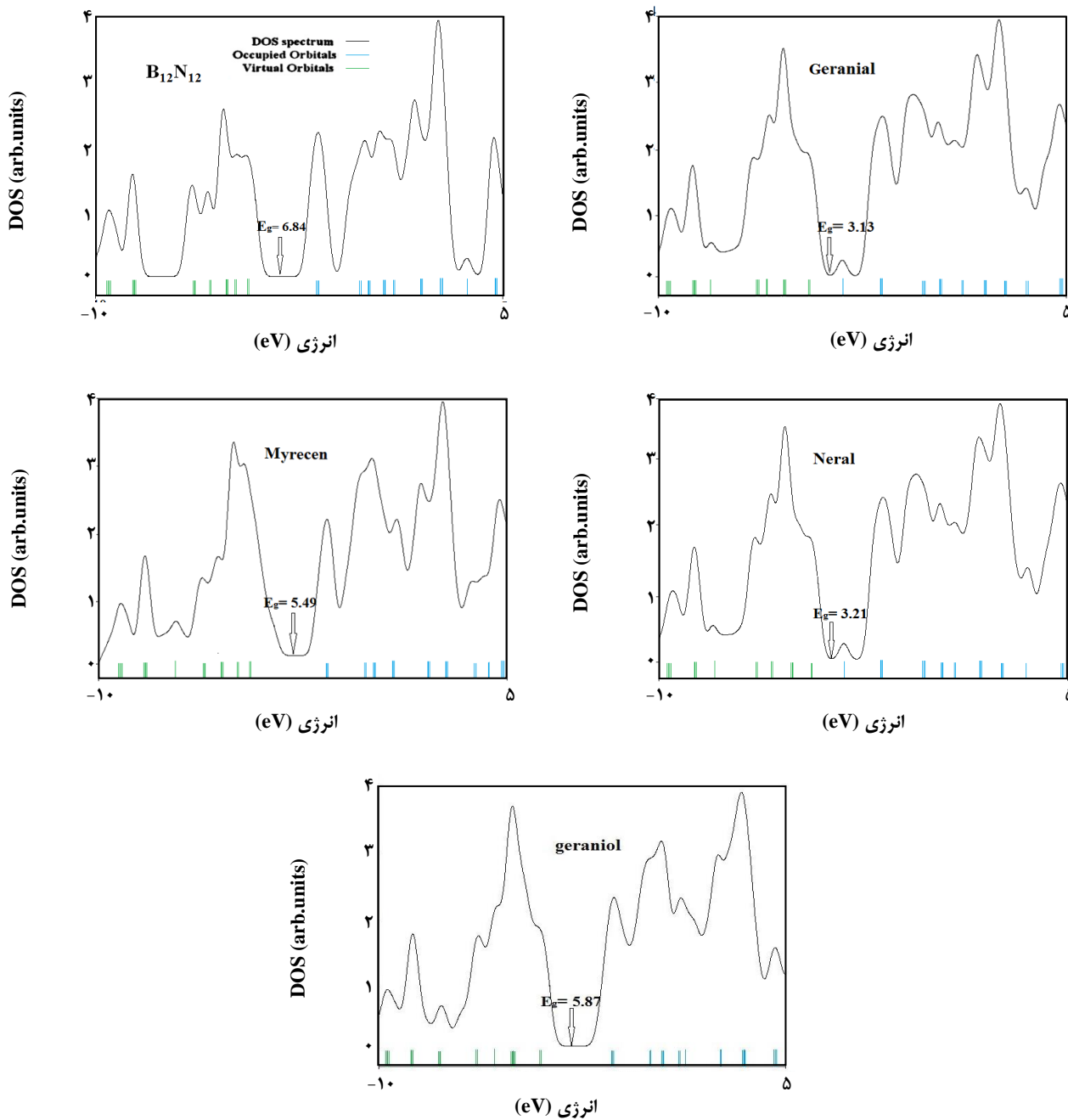
Nano structure	$E_{HOMO}(H)$	$E_{HOMO}(eV)$	$E_{LUMO}(H)$	$E_{LUMO}(eV)$	$\eta(H) = \epsilon_L - \epsilon_H$	$\eta(eV) = \epsilon_L - \epsilon_H$
B...O	-۰/۲۳۷	-۶/۴۴۹	-۰/۰۲۱	-۰/۵۷۱	۰/۲۱۶	۵/۸۷۸
B...double bond	-۰/۱۵۶	-۴/۲۴۵	۰/۰۴۹	۱/۳۳۳	۰/۲۰۵	۵/۵۷۸
B...CH <sub>۳</sub>	-۰/۱۳۷	-۳/۷۲۸	۰/۰۴۹	۱/۳۳۳	۰/۱۸۶	۵/۰۶۱



شکل ۴- ساختارهای بهینه شده ی کمپلکس ها در اثر برهمکنش ژرانیول با نانو ذره بورنیتريد.

شکل ۴ ساختارهای بهینه شده ی کمپلکس ها در اثر برهمکنش ژرانیول با نانو ذره بورنیتريد را نشان می دهد. با توجه به جداول ۷ و ۸ انرژی مطلق در برهمکنش بین اتم بور با اتم اکسیژن منفی تر از برهمکنش بین اتم بور با باند دوگانه و گروه متیل بوده و کمپلکس تشکیل شده پایدارتر است. انرژی جذب نیز در برهمکنش بین اتم بور با اتم اکسیژن منفی تر بوده

پس برهمکنش اول پایدارتر می باشد. همچنین هر چه انرژی پایداری (انرژی جذب) منفی تر باشد این نشان دهنده برهمکنش قوی تری است. فاصله برهمکنش در کمپلکس اول کوتاه تر بوده و میزان جذب انجام شده بیشتر است پس کمپلکس اول پایدارتر می باشد. میزان شکاف نوار نیز در برهمکنش بین اتم بور با پیوند دوگانه کم تر از برهمکنش اتم بور با گروه متیل است.



شکل ۵ - نمودارهای دانسیته حالت (DOS) برای برهمکنش بین منوترپن‌های خطی و نانو ذره بور نیتريد.

از یافته‌های موجود در این پژوهش می‌توان این نتیجه را گرفت که از مقایسه انرژی جذب تمام کمپلکس‌های تشکیل شده از برهمکنش نانو ذره بور نیتريد با منوترپن‌های خطی منوترپن خطی نرال و ژرانیال شدیدترین برهمکنش را با نانوفولرن بورنیتريد داشته زیرا مقدار انرژی جذب کمپلکس‌های تشکیل شده از برهمکنش نرال و ژرانیال با نانو ذره بورنیتريد منفی‌تر از

که این نشان دهنده قوی‌ترین برهمکنش نسبت به دو برهمکنش دیگر است. بنابراین کمپلکس اول پایدارتر از دو کمپلکس دیگر می‌باشد. فاصله برهمکنش در کمپلکس اول کوتاه‌تر بوده و میزان جذب انجام شده بیش‌تر است پس کمپلکس اول پایدارتر می‌باشد. همچنین اختلاف سطح انرژی هومو و لومو در برهمکنش اتم بور با اتم اکسیژن کمتر از برهمکنش اتم بور با پیوند دوگانه است.

شکاف نوار را دارد. در نتیجه نانو ذره بورنیتريد ( $B_{12}N_{12}$ ) می‌تواند به عنوان یک حسگر خوب برای این دو آلدئید بکار رود.

### نتیجه‌گیری

در این پژوهش، محاسبه‌های نظریه‌ی تابعی دانسیته به منظور بررسی برهمکنش بین مونوترپن‌های خطی و نانو ذره بور نیتريد انجام شد. بهینه‌سازی ساختاری در سطح نظری  $B3LYP/6-31G^*$  انجام شد. هر مونوترپن از جهت‌های گوناگون با اتم بور موجود در نانو ذره بور نیتريد برهمکنش داد. بر اساس نتیجه‌های به دست آمده مشخص شد که مونوترپن‌های خطی نرال و ژرانیاال شدیدترین برهمکنش را با نانوفولرن بورنیتريد داشت. زیرا مقدار انرژی جذب کمپلکس آن‌ها منفی‌تر از سایر کمپلکس‌ها است. همچنین نتیجه‌ها نشان می‌دهند که همه انرژی‌های جذب به دست آمده منفی هستند و این نشان می‌دهد که برهمکنش مونوترپن‌های خطی با نانوفولرن بورنیتريد فرایندی مطلوب است.

تاریخ دریافت: ۱۳۹۴/۹/۴ ؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۵/۷/۵

مقدار انرژی جذب کمپلکس‌های تشکیل شده از برهمکنش نانوذره بور نیتريد با ژرانیاال و میرسن است. انرژی‌های جذب برای تمام ساختارهای مورد مطالعه با استفاده از معادله (۱) به دست آمد. با این حال، میزان پایداری کمپلکس  $B_{12}N_{12}$  - نرال نسبت به کمپلکس  $B_{12}N_{12}$  - ژرانیاال به تقریب برابر و به اندازه ۰/۱۳ کیلوژول برمول بیش‌تر است که قابل چشم‌پوشی می‌باشد. علت یکسان بودن پایداری این دو کمپلکس، شباهت ساختاری دو مونوترپن خطی است که هر دو آلدئید می‌باشند.

برای بررسی و اثبات اینکه نانوذره بور نیتريد می‌تواند به عنوان حسگر برای مونوترپن‌های خطی مورد استفاده قرار گیرد، از نمودارهای دانسیته حالت (DOS) استفاده شد (شکل ۵). همان‌گونه که در شکل ۵ پیداست، می‌توان پی برد که در اثر جذب مونوترپن‌های خطی روی نانوذره بور نیتريد نمودار دانسیته حالت (DOS) تغییراتی می‌کند که این تغییرها و همچنین اختلاف شکاف نوار بین تراز هومو و لومو در مونوترپن‌های خطی مورد مطالعه خیلی متفاوت است. با توجه به اختلاف شکاف نوار بین تراز هومو و لومو می‌توان نتیجه گرفت که دو آلدئید ژرانیاال و نرال به ترتیب با ۳/۱۳ و ۳/۲۱ الکترون ولت کم‌ترین اختلاف

### مراجع

- [۱] شفقت، ع؛ شیمی اسانس‌ها و عطر درمانی، نشر نگین سبلان ص ص. ۱۱۱-۱۵۱ (۱۳۹۰)
- [۲] سفیدکن، ف؛ شیمی و تهیه صنعتی روغن‌های اسانسی، نشر زاوش، ص. ۵۵ (۱۳۸۶)
- [3] Vessally E., Dehbandi B., Edjlali L., [DFT Study on the Structural and Electronic Properties of Pt-Doped Boron Nitride Nanotubes](#), *Russ. J. Phys. Chem.*, **90**: 1217-1223 (2016).
- [4] Oku T., Kuno M., Kitahara H., Narita I., [Formation, Atomic Structures and Properties of Boron Nitride and Carbon Nanocage Fullerene Materials](#), *Int. J. Inorg. Mater.*, **3**: 597-612 (2001).
- [5] Seifert, G., Fowler, R. W., Mitchell, D., Porezag, D., Frauenheim, T., [Boron-Nitrogen Analogues of the Fullerenes: Electronic and Structural Properties](#), *Chem. Phys. Lett.*, **268**: 352-358 (1997).
- [6] Oku T., Nishiwaki A., Narita, [Formation and Atomic Structure of  \$B\_{12}N\_{12}\$  Nanocage Clusters Studied by Mass Spectrometry and Cluster Calculation](#), *Sci. Tech. Adv. Mater.*, **5**: 635-638 (2004).
- [7] Strout, D. L. [Structure and Stability of Boron Nitrides: Isomers of  \$B\_{12}N\_{12}\$](#) , *J. Phys. Chem. A*, **104**: 3364-3366 (2000).
- [8] Strout D.L., [Structure and Stability of Boron Nitrides: The Crossover between Rings and Cages](#), *J. Phys. Chem. A*, **105**: 261-263 (2001).



[9] Baei, M.T., Ahmadi Peyghan A., Bagheri Z., A DFT Study on CO<sub>2</sub> Interaction with a BN Nano-Cage Bull. Korean, Chem. Soc., 33: 3338-3342 (2012).

[۱۰] بلبل امیری، محدثه؛ ارشدی، ستار؛ عزیزی، زهرا؛ بررسی برهم‌کنش گاز خردل بر روی نانولوله‌های آلومینیم - نیتريد زيگزاگ (۴، ۰)، (۵، ۰) و (۶، ۰)، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۴): ۳۳ تا ۴۱ (۱۳۹۳).

[۱۱] عبدالشاهی‌نژاد، سارا؛ برقی، سید مهدی؛ سیدی، مجتبی؛ حذف کروم شش ظرفیتی توسط نانوذره‌های فریت، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۱): ۳۴ تا ۳۷ (۱۳۹۴).

[۱۲] جورشعبانی، میلاد؛ بدیعی، عیرضا؛ لشگری، نگار؛ محمدی زیارانی، قدسی؛ تهیه و شناسایی نانومتخلخل V-SBA-۱۶ و کاربرد آن به عنوان کاتالیست در فرایند اکسایش مستقیم بنزن به فنل، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۳): ۳۴ تا ۲۰ (۱۳۹۴).

[۱۳] زمان خان، حسین؛ آیتی، بیبا؛ گنجی‌دوست، حسین؛ تجزیه فتوکاتالیستی فنل به وسیله نانوذرات روی اکسید تثبیت شده بر بستر بتنی، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۳ و ۴): ۳۱ تا ۹ (۱۳۹۱).

[۱۴] بشارتی سیدانی، عباس؛ غلامی، محمدرضا؛ تخریب فتوکاتالیستی یک نمونه رنگ آزو به کمک نانوکامپوزیت‌های بر پایه TiO<sub>2</sub> اصلاح شده با فلزهای Pd، Pt و Ni، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۱): ۳۴ تا ۴۹ (۱۳۹۴).

[۱۵] باوفا، ص؛ باوفا، ف؛ آموزش کاربردی نرم افزارهای Gaussian, ChemOffice, GuassView, HyperChem, AIM انتشارات اندیشه سرا، صص. ۳۱-۶۹ (۱۳۸۸)