Archive of SID

دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر
فصلنامه‌ی کاربرد شیمی در محیط زیست

بررسی ثابت نیروی پیچشی در نانو لوله‌های کربنی با استفاده از روش کوانتومی تئوری تابعیت چگالی (DFT)

مهدی احمدی سابق
گروه شیمی و مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر، اهر- ایران
محمد قاسم نژاد اسفهلان
آزمایشگاه تحقیقاتی و تخصصی شیمی فیزیک و
واحد تحقیق و توسعه شرکت پدیده روغن نانو، دانشگاه تربیت معلم آذربایجان، تبریز- ایران

چکیده

نانو ساختارهای کربنی خالص و مخصوصاً نانو لوله‌ها دارای خواص جالب و مکانیکی هستند که وابسته به قطر و آرایش آن‌ها می‌باشد. پتانسیل زاویه دو وجهی ناشی از برهم‌کنش‌های پیچشی در مولکول است. پتانسیل زاویه دو وجهی پیچش اتم‌ها حول پیوند شیمیائی می‌باشد بنابراین نقش مهمی در آرایش فضائی مولکول‌ها دارد. پتانسیل زاویه دو وجهی به صورت تابع کوسینوسی بیان می‌شود.در این مقاله مقدار جدیدی برای این ثابت گزارش می‌شود.

کلید واژه: نانو ساختارهای کربنی, آرایش فضائی

مقدمه:

تعریف میدان نیرو

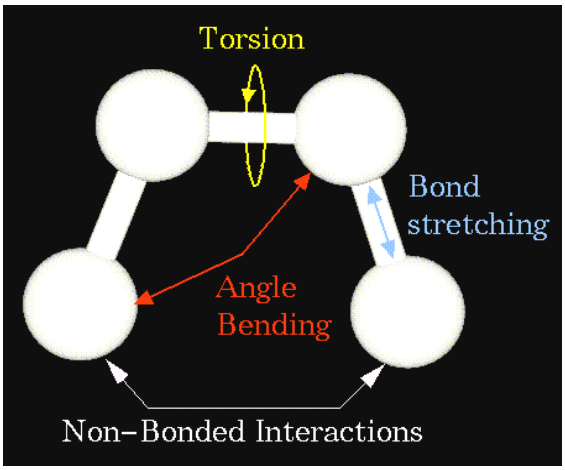
یک میدان نیرو مجموعه از معادلاتی است که برهم‌کنش بین اتم‌ها را فرمول بندی کرده است. [۱]

این برهم‌کنش‌ها به طور معمول در دو گروه طبقه بندی می‌شوند:

برهم‌کنش‌های درون مولکولی و برهم‌کنش‌های بین مولکولی. شکل (۱-۱)

www.SID.ir

Archive of SID

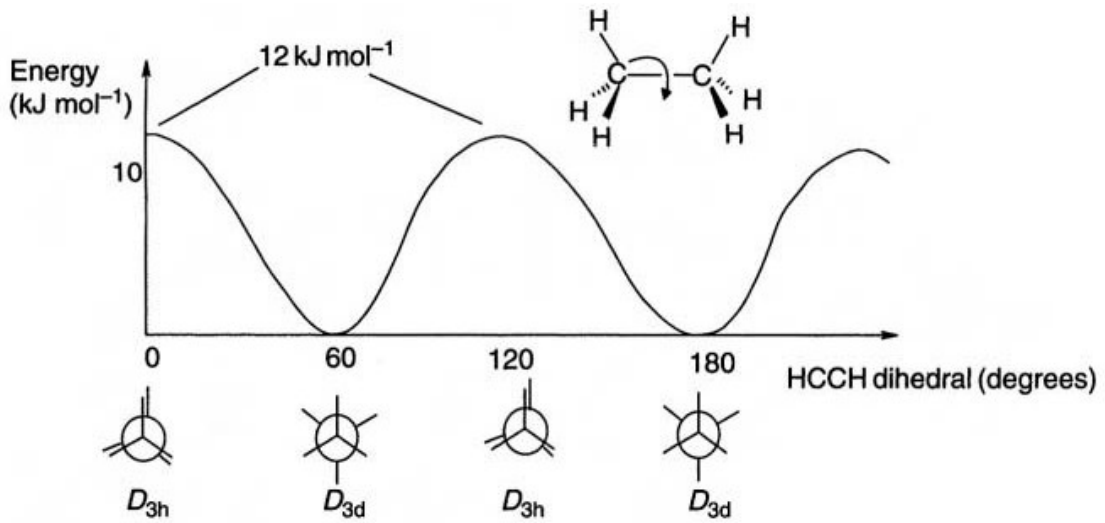


شکل (۱-۱): برهم‌کنش‌ها در مولکول‌ها

پتانسیل زاویه دو وجهی ناشی از برهم‌کنش‌های پیچشی در مولکول است. شکل، زاویه دو وجهی بین دو صفحه که در آن چهار اتم به یکدیگر متصل هستند را نشان می‌دهد. پتانسیل زاویه دو وجهی پیچش اتم‌ها حول پیوند شیمیائی می‌باشد بنابراین نقش مهمی در آرایش فضائی مولکول‌ها دارد. پتانسیل زاویه دو وجهی به صورت تابع کوسینوسی بیان می‌شود:

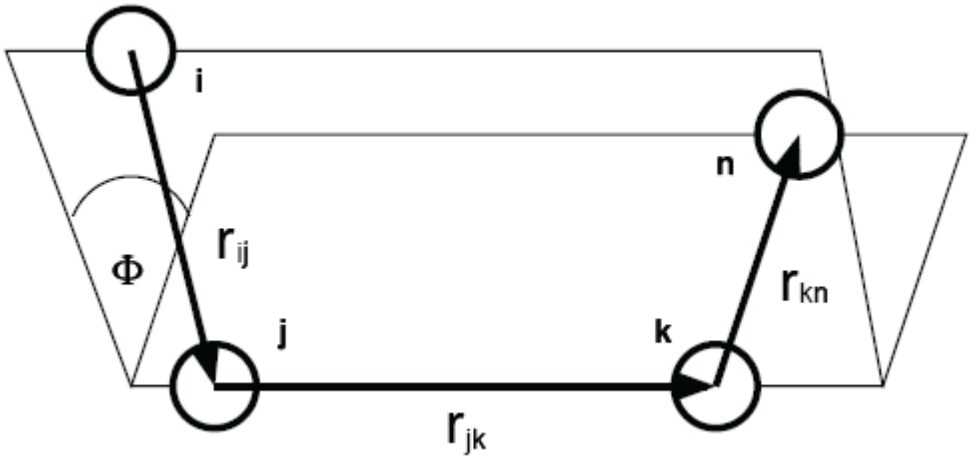
$$U_{dihedral} = K_1\left(1+\cos(\phi)\right)+K_2\left(1-\cos(2\phi)\right)+K_3\left(1+\cos(3\phi)\right)$$

مثالی که در این زمینه می توان زد تصاویر نیومن مولکول اتان می باشد. [۲] شکل(۱-۲)



www.SID.ir

Archive of SID



شکل(۱-۲): زاویه دو وجهی میان چهار اتم و مولکول اتان

آزمایش ثابت پیچشی نانولوله‌ی کربنی

در مورد ثابت پیچشی نانولوله‌ی کربنی که اولین بار توسط Walther و همکارانش [۳] ارائه شد ما به آزمایش آن پرداختیم و متوجه شدیم مقدار ذکر شده مقدار واقعی نمی‌باشد.

روش گفته شده و کار صورت گرفته به این صورت است که مولکول تتراسن $C_{12}H_{18}$ را در دو حالت مسطح و خمیده در نظر گرفته سپس توسط روشهای کوانتومی انرژی هر دو حالت را حساب می‌کنیم و اختلاف انرژی میان حالت مسطح یعنی پایدارترین حالت و حالت خمیده (حالت غیرپایدار) طبق رابطه‌ی (۱-۲) معیاری برای اندازه‌گیری ثابت پیچش چهار اتم کربن (C-C-C-C) در نانولوله می‌باشد.

$$K_{\varphi} = 2\Delta E_{curve}\left(1-\cos 2\varphi_{ijkl}\right) \qquad (۱-۲)$$

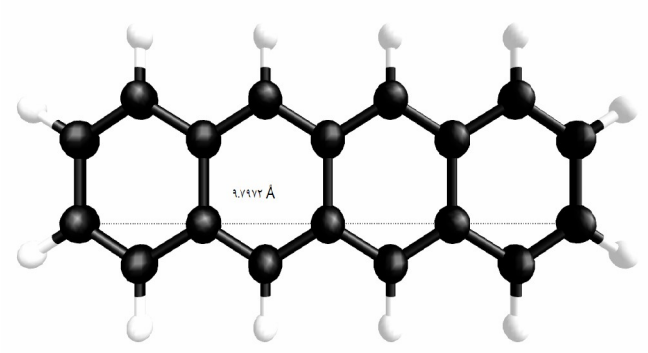
ما با تکرار این روش علت اختلاف مقدارگفته شده‌ی $Kj.mol^{-1}$ ۲۵/۱۲ [۳] و مقدار به دست آورده‌ی $Kj.mol^{-1}$ ۳۲/۱۴ را به این صورت می‌توانیم بیان کنیم:

که طول پیوند کربن ـ کربن گفته شده در کار قبلی مقدار A^0 ۱/۴۱۸ [۳] می‌باشد که مقدار دقیقی نیست که در کار قبلی به عنوان معیار در نظر گرفته شده است بلکه مقدار A^0 ۱/۴۲۲ [4] مقداری است که باید به کار برده می‌شد که ما هم به کار بردیم. این اختلاف $0.04\ A^0$ باعث می‌شود اولاً در تتراسن مسطح طول آن کوچکتر و مقدار انرژی محاسبه شده برای آن توسط روش‌های کوانتومی مقدار غیرواقعی و نیز در تتراسن خمیده نیز فاصله بین دو کربن ابتدائی و انتهائی مقدار (۹,۴۸ A^0) باشد که از مقدار واقعی آن در نانولوله (۰ و ۱۲) کمتر می‌باشد (۹,۷۹ A^0) .

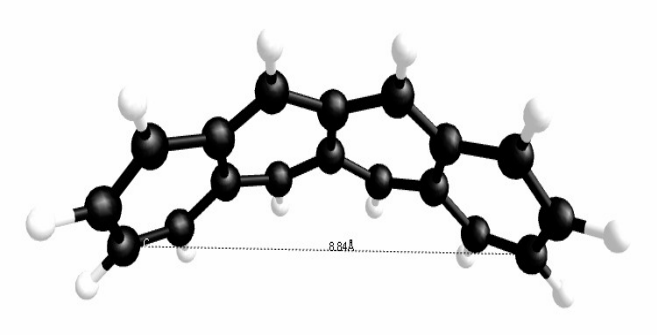
حال اختلاف انرژی میان دو حالت مسطح و خمیده حساب شده از روی آن مقدار $Kj.mol^{-1}$ ۲۵/۱۲ به دست آورده‌اند. در حالی که ما مقدار $Kj.mol^{-1}$ ۳۲/۱۴ را به دست آوردیم که دلیل اختلاف همان طول پیوند کربن ـ کربن به کار برده شده می‌باشد شکل (۱-۳) و (۱-۴).

www.SID.ir

Archive of SID



شکل (۱-۳): تتراسن مسطح که در آن فاصله میان کربن های انتهائی ۹,۷۹ آنگستروم است



شکل (۱-۴): تتراسن خمیده که در آن فاصله میان کربن های انتهائی ۸,۸۴ آنگستروم است

منابع:

[1] Ahmet Ozgur Yazaydin,2007, Molecular simulation of the adsorption of organics
From water , Degree of Doctor of Philosophy, Worcester polytechnic institute.

[2] Lewars, E. 2003, Computational Chemistry. Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics ,Kluwer.
[3] J.H.Walther, R.Jaffe,T.Halicioioglu and andp.Koumoutsakos , J.Phys.Chem.B 2001, 105, 9980- 9987.
[4] C. T. Whitc, D. H. Robertson, and J. W. Mintmire, (1 993), Phys. Rev. B 47, 5485.

www.SID.ir