مطالعه برهم کنش نانوصفحه های کربنی با آلاینده های آب به روش نظریه تابعی دانسیته

عصمت شجاعی *,227,

1395-11-28

خواص الکترونیکی و مکانیکی منحصر به فرد گرافن توجه زیادی را به سمت این ماده جلب کرده است. گرافن تک لایه، ماده دو بعدی است که از شبکه کربنی شش ضلعی با ضخامت تک اتم و الکترون های π غیر موضعی تشکیل شده و در تولید خازن های الکتریکی و هم چنین در جذب مولکول های آلاینده آلی از محلول های آبی رقیق به کار می رود و با ایجاد یک کمپلکس با اثر متقابل جاذبه غیرالکترواستاتیکی و الکترواستاتیکی همراه می باشد. هر دو نوع برهم کنش به ویژگی سطح جاذب و جذب شونده و شیمی محلول بستگی دارد. در این پروژه بر هم کنش بین مولکول آلی 2،4- دی کلرو فنوکسی استیک اسید با نانوصفحه کربنی بررسی شده است. تمامی محاسبات با استفاده از روش نظریه تابعی دانسیته، تابع هیبریدی B3LYP و سری پایه 6-31G(d) برای بهینه سازی کمپلکس های مورد نظر انجام شد. آنالیز اربیتال طبیعی پیوند (NBO) و محاسبات فرکانس نیز بر روی تمامی ساختارهای مورد مطالعه با روش B3LYP (بک، 3 پارامتر، لی- یانگ- پار) و سری پایه 6-31G(d) در 298 K صورت گرفت. بر اساس نتایج به دست آمده، کمپلکس های حاصل از جذب شیمیایی بین مولکول ۲،۴- دی کلرو فنوکسی استیک اسید و نانوصفحه به طور خود به خودی تشکیل می شود ولی تشکیل کمپلکس های حاصل از جذب فیزیکی از نظر ترمودینامیکی امکان پذیر نمی باشد. با استفاده از نتایج مطالعات NBO مقادیر انرژی HOMO و LUMO و همچنین توابع وابسته به آنها نیز محاسبه شد.

کلمات کلیدی : ۲،۴- دی کلرو فنوکسی استیک اسید ، نانوصفحه کربنی، نظریه تابعی دانسیته ، کمپلکس

Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database
دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها