دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده شیمی

دفاعیه کارشناسی ارشد

بررسی نظری برهم‌کنش انواع مختلف نانوقفس‌ها با عامل عصبی تابون : آشکارسازی ، جذب و تخریب

ارائه شده توسط:

پریا فلَاحی

استاد راهنما:

دکتر حسین فرخ‌پور

استاد مشاور:

دکتر حمیدرضا جویپازاده

روز و تاریخ :

یک‌شنبه مورخ ۱۳۹۶/۶/۲۶ رأس ساعت ۱۰:۳۰ صبح

مکان : سالن سمینار

در این پایان‌نامه ،با استفاده از مطالعات نظری،جذب مولکول تابون روی برخی از مهم‌ترین نانوقفس‌ها شامل $Mg_{12}O_{12}$,$C_{12}Si_{12}$,$Be_{12}O_{12}$,$B_{12}N_{12}$,$Al_{12}P_{12}$,$Al_{12}N_{12}$ و C_{24} را مورد بحث و بررسی قرار داده‌ایم. تمامی محاسبات مربوط به بهینه‌سازی مولکول تابون،نانوقفس‌ها و کمپلکس‌های مربوطه ،محاسبه‌ی مقادیر انرژی جذب(E_{ads})،برهم‌کنش (E_{int})و تغییرشکل(E_{def})،تحلیل اوربیتال طبیعی پیوندی(NBO)،بررسی نظریه کوانتومی اتم در مولکول(QTAIM) و هم‌چنین محاسبات مربوط به توصیف‌گرهای مولکولی کوانتومی،با استفاده از نظریه تابعی چگالی(DFT) و روش B3LYP-D3 در سطح 6-31G(d) انجام شده‌اند. نرم‌افزار کوانتومی مورد استفاده برای انجام این محاسبات، نرم‌افزار گوسین (Gaussian 09) ،می‌باشد. با بررسی مقادیر انرژی‌های جذب محاسبه‌شده (Eads) می‌بینیم که نانوقفس $Mg_{12}O_{12}$ بالاترین مقدار انرژی جذب(E_{ads}) را بدون اینکه هیچ تغییر شیمیایی در ساختار مولکول تابون ایجاد کند، دارد.این در حالی است که نانوقفس $Al_{12}N_{12}$ در مقایسه با نانوقفس $Mg_{12}O_{12}$، این مزیت را دارد که مولکول تابون را روی سطح خود تخریب می‌کند .در این بررسی، جهت‌گیری اتم‌های مولکول تابون نسبت به اتم‌های نانوقفس و به‌عبارتی مهم‌ترین اتم‌ها از مولکول تابون که نقش اصلی در برهم‌کنش با نانوقفس‌ها را دارند،بیان شده‌اند،به‌این صورت که اتم O در پیوند P=O مولکول تابون با اتم‌های Al،Be،B،Si وC در نانوقفس‌ها برهم‌کنش داده‌است.با انجام محاسبات NBO و به‌دست آوردن مقادیر انرژی‌های HOMO و LUMO به بررسی توصیف‌گرهای مولکولی کوانتومی مانند شکاف انرژی(E_g)،پتانسیل شیمیایی(μ)،سختی(η)و الکترون‌دوستی(ω) برای کمپلکس‌ها محاسبه شده‌اند. ازنظریه‌ی کوانتومی اتم در مولکول (QTAIM) برای بررسی ذات و طبیعت برهم‌کنش‌های بین مولکول تابون و نانوقفس‌ها استفاده شده است. بررسی‌ها نشان داده‌اند که برهم‌کنش بین تابون و نانوقفس‌ها ازواندروالسی تا نزدیک کواالانسی تغییر کرده‌اند. پتانسیل نانوقفس‌ها در حسگری مولکول تابون نیز با محاسبه‌ی طیف جذب UV کمپلکس‌ها و نمودار چگالی سطح آن‌ها (DOS) انجام شده است. نانوحسگرها این توانایی و ظرفیت را دارند که همهٔ معیارهای لازم برای یک پلت فرم مؤثر در شناسایی مقادیر ناچیز عوامل شیمیایی را فراهم کنند.محاسبات نشان می‌دهند که چهار نانوقفس $Al_{12}P_{12}$، $Be_{12}O_{12}$، $B_{12}N_{12}$ و C_{24} پتانسیل خوبی برای حسگری تابون دارند.

کلمات کلیدی:

تابون،آشکارسازی،جذب،تاریب،نانوقفسها،B3LYP–D3 .