

مطالعه ی نظری خواص نوری غیرخطی و الکترونی نانو پولک های مثلثی کربنی-بور-

نیتزیدی

احسان شاکرزاده*

گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

تاریخ دریافت: ۹۶/۰۱/۲۴

تاریخ تصحیح: ۹۶/۰۳/۳۰

تاریخ پذیرش: ۹۶/۰۴/۱۳

چکیده

در این پژوهش با استفاده از محاسبات نظریه تابعیت چگالی (DFT) خواص نوری غیرخطی و الکترونی نانو پولک های مثلثی کربنی-بور-نیتزیدی ($C_{40}B_3N_3H_{18}$) بررسی شده اند. اخیراً سنتز و مطالعه ی خواص نانو ساختارهای هیبریدی کربنی-بور-نیتزیدی توجه زیادی را به خود جلب کرده است. نانوپولک کربنی $C_{46}H_{18}$ در نظر گرفته شده و یک حلقه B_3N_3 در این نانوپولک با الگوهای مختلف جایگزین شدند. نتایج بدست آمده حاکی از آن است که علی رغم اینکه خواص الکترونی تحت تاثیر این جایگزینی قرار نمی گیرد ولی پاسخ نوری غیرخطی آن در حالتی که اتم نیتروژن در رأس نانوپولک واقع شود، بطور چشمگیری افزایش می یابد. با توجه به کاربردهای بالقوه مواد با پاسخ نوری غیرخطی در طراحی دستگاه های نوری، نتایج این پژوهش افق جدیدی در طراحی ابزارهای نوری بر پایه نانوساختارهای هیبریدی کربنی-بور-نیتزیدی فراهم آورد.

کلمات کلیدی: شکاف HOMO-LUMO، فراقطبش پذیری، محاسبات DFT، نانو پولک.

۱- مقدمه

در دهه ی اخیر مواد با خواص نوری غیرخطی توجه زیادی را به خود جلب کرده اند و پروژه های گسترده ای را در علم مواد در بر گرفته اند. این مواد در پردازش اطلاعات نوری، تبدیل فرکانس های نوری و ذخیره ی داده های نوری مواد مؤثر هستند هر چند بیشترین کاربرد آنها در لیزر است. تا کنون مطالعه های تجربی و تئوری فراوانی در طراحی مواد به منظور افزایش پاسخ نوری غیر خطی آنها انجام گرفته است [۸-۱]. بدین منظور استراتژی های متفاوتی از قبیل وارد کردن سیستم های با الکترون نفوذی اضافی و هیبرید کردن ساختارهای مختلف گزارش شده اند [۹-۱۴]. با توجه به کاربردهای بالقوه این مواد تلاش زیادی برای طراحی و سنتز مولکول های با پاسخ نوری غیر خطی چشمگیر اختصاص داده شده است. در نتیجه تلاش بر این است که ماده ای طراحی شود که با تغییر در ساختار آن، پاسخ نوری غیرخطی در آن تغییر کند. نانومواد به دلیل خواص ویژه و همچنین کاربردهای تکنولوژیکی فراوان، توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کردند.

با بررسی باکی بال و نانولوله‌ها که مواد شناخته شده‌ی اولیه در علم نانو بوده‌اند مشخص شده که علم نانو و به دنبال آن فناوری نانو یک فناوری جدید ولی بسیار جالب توجه است به گونه‌ای که توجه دانشمندان را در زمینه‌های مختلف علمی به خود جلب کرده است [۱۶، ۱۵]. در این میان هترو نانو ساختارهای کربنی-بور-نیتتریدی به دلیل دارا بودن خواص تنظیم پذیر الکترونی و نوری مختلف اخیراً مورد توجه بسیاری از دانشمندان در زمینه‌های مختلف قرار گرفته‌اند [۲۴-۱۷]. تاکنون مطالعات مختلفی بروی هترونانو لوله‌های کربنی-بور-نیتتریدی صورت گرفته است و خواص الکترونی و پاسخ نوری غیر خطی^۱ (NLO) آنها بررسی شده است. در سال ۲۰۱۳ نشان داده شده است که نانو لوله‌های کربنی-بور-نیتتریدی دارای پاسخ نوری غیر خطی قابل توجهی نسبت به نانو لوله‌های کربنی و یا بورنیتتریدی خالص هستند. همچنین مقادیر پاسخ NLO این هترونانو لوله‌ها به الگوی اتصال نانو لوله‌های کربنی به نانولوله‌های بورنیتتریدی وابسته است [۱۸]. همچنین ساختار الکترونی کلاستر $B_{12}C_6N_6$ را بررسی شده است و نشان داده شده است که افزایش قطعه‌های BN در نانو لوله‌های کربنی با الگوهای متفاوت اتصالی باعث افزایش اولین فراقطبش پذیری می‌باشد [۱۷]. علاوه بر این گزارش شده است که شکاف انرژی اوربیتالی LUMO-HOMO، هترو نانو لوله‌های کربنی-بور-نیتتریدی به طور قابل توجهی با ترکیب نانو لوله‌های کربنی و بور-نیتتریدی قابل تنظیم است. اخیراً پژوهشی در گروه تحقیقاتی ما صورت گرفته است و خواص الکترونی و نوری نانو کلاستر هیبریدی $C_{2n}(BN)_{12-n}$ انجام شده است [۲۵]. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که هیبرید کردن ساختارهای کربنی با ساختارهای بور نیتتریدی بطور چشمگیری پاسخ نوری غیر خطی آنها را بهبود می‌دهد. هدف از این پژوهش آن است که خواص نوری غیر خطی و الکترونی نانو پولک‌های مثلثی کربنی-بور-نیتتریدی ($C_{40}B_3N_3H_{18}$) بررسی شود. این پژوهش بر اساس محاسبات نظریه تابعیت چگالی^۲ (DFT) انجام شده است و تاثیر وارد کردن حلقه B_3N_3 در نانوپولک کربنی خالص بر روی خواص الکترونی و نوری غیر خطی آنها بررسی می‌گردد.

۲-مدلسازی

ساختار هندسی نانو پولک‌های مورد بررسی با روش B3LYP و مجموعه پایه 6-31G(d) بهینه‌سازی شدند. برای همه‌ی ساختارهای مورد بررسی محاسبات فرکانس‌های ارتعاشی با سطح محاسباتی ذکر شده صورت پذیرفت. همه‌ی ساختارها فاقد فرکانس مجازی بوده‌اند که نشان دهنده‌ی مینیمم بودن این ساختارها در سطح انرژی پتانسیل می‌باشند. در بررسی خواص الکترونی، میزان شکاف HOMO-LUMO (HLG) و الکترون دوستی^۳ (ω) مورد توجه قرار گرفته‌اند که به صورت معادله-های (۱) و (۲) تعریف می‌گردند:

$$HLG = \varepsilon_L - \varepsilon_H \quad (1)$$

¹ Nonlinear optical

² Density Functional Theory

³ Electrophilicity

$$\omega = \frac{(\varepsilon_L + \varepsilon_H)^2}{8(\varepsilon_L - \varepsilon_H)} \quad (۲)$$

که در آن ε_L و ε_H به ترتیب بیانگر انرژی‌های بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده^۴ (HOMO) و پایین ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده^۵ (LUMO) هستند. دیگر خاصیت الکترونی مورد بررسی، تابع کار^۶ (ϕ) می‌باشد. این کمیت بیانگر کمینه‌ی انرژی لازم برای جدا کردن یک الکترون از سطح فرمی^۷ (E_F) به نقطه‌ای که به اندازه کافی دور باشد تا تحت تاثیر ماده قرار نگیرد، است. بر این اساس با صفر در نظر گرفتن پتانسیل الکتروستاتیکی در بینهایت معادله (۳) را خواهیم داشت:

$$\phi = -E_F = -(\varepsilon_L + \varepsilon_H) \quad (۳)$$

انرژی مولکول در حضور میدان الکتریکی ضعیف و یکنواخت را می‌توان به صورت معادله‌ی بسطی (۴) بیان نمود:

$$E = E^0 + \left(\frac{dE}{d\varepsilon}\right) F_\alpha + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2E}{d\varepsilon^2}\right) F_\alpha F_\beta + \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3E}{d\varepsilon^3}\right) F_\alpha F_\beta F_\gamma + \dots = \quad (۴)$$

$$E^0 - \mu_\alpha F_\alpha - \frac{1}{2} \alpha_{\alpha\beta} F_\alpha F_\beta - \frac{1}{6} \beta_{\alpha\beta\gamma} F_\alpha F_\beta F_\gamma - \dots$$

که در معادله (۴)، E^0 نشان‌دهنده‌ی انرژی کل مولکول در غیاب میدان الکتریکی و F_α بیانگر مولفه‌ی میدان الکتریکی در جهت α است. μ_α ، $\alpha_{\alpha\beta}$ و $\beta_{\alpha\beta\gamma}$ به ترتیب ممان دوقطبی، قطبش پذیری و اولین فراقطبش پذیری را نشان می‌دهند. هر اثری ناشی از جمله‌های دوم یا بالاتر این سری را اثرهای غیرخطی نامند. زیرا از جمله‌هایی ناشی می‌شوند که نسبت به میدان الکتریکی غیرخطی هستند و از این رو آن دسته از موادی که رفتار نور در اثر تابش به آنها نسبت به میدان الکتریکی ناخطی است را مواد نوری غیرخطی (NLO) می‌نامند. اولین فراقطبش پذیری یک تانسور مرتبه سوم $3 \times 3 \times 3$ می‌باشد که دارای ۲۷ عنصر است. بر اساس تقارن این ۲۷ عنصر به ۱۰ آرایه کاهش می‌یابد. این عناصر شامل β_{xyz} ، β_{xxz} ، β_{yyy} ، β_{xyy} ، β_{xyx} ، β_{xxx} ، β_{zzz} ، β_{yzz} ، β_{xzz} ، β_{yyz} می‌باشند. مقدار بزرگی اولیه‌ی قطبش‌پذیری (β_0) از معادله‌های زیر قابل محاسبه است [۲۶، ۲۷].

$$\beta_0 = (\beta_x^2 + \beta_y^2 + \beta_z^2)^{1/2} \quad (۵)$$

$$\beta_x = (\beta_{xxx} + \beta_{yyy} + \beta_{zzz}) \quad (۶)$$

$$\beta_y = (\beta_{yyy} + \beta_{yxx} + \beta_{yzz}) \quad (۷)$$

$$\beta_z = (\beta_{zzz} + \beta_{zxx} + \beta_{zyy}) \quad (۸)$$

⁴ Highest Occupied Molecular Orbital

⁵ Lowest Unoccupied Molecular Orbital

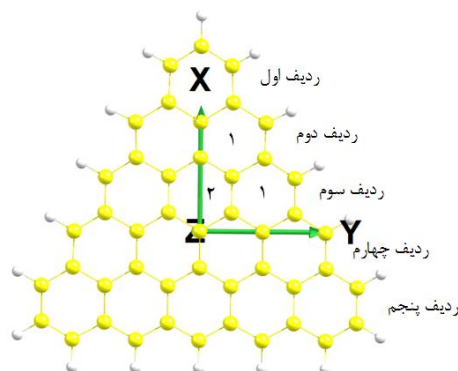
⁶ Work Function

⁷ Fermi Level

عناصر قطبش پذیری و همچنین کلیه محاسبات با استفاده از نرم افزار کاربردی شیمی محاسباتی Gaussian 09 محاسبه گردیده اند. محاسبات فراقطبش پذیری با استفاده از روش های LC-BLYP و BHandHLYP به همراه مجموعه پایه ی 6-311G(d) انجام شده است. کارایی مطلوب این دو روش در محاسبات فراقطبش پذیری در تحقیقات پیشین مطرح شده است [۲۸].

۳- نتایج و بحث

ساختار هندسی نانو پولک مثلثی با فرمول $C_{46}H_{18}$ که در سطح محاسباتی B3LYP/6-31G(d) بهینه شده است، در شکل (۱) نشان داده شده است. این نانو پولک دارای پنج ردیف از حلقه های شش گوشه ی کربنی است. انتهای این نانو پولک با اتم های هیدروژن اشباع شده است. سیستم مورد بررسی با ۲۹۴ الکترون یک سیستم قشر بسته می باشد. پیوندهای C-C در راستای X با اندازه ی $1/44 \text{ \AA}$ اندکی بزرگتر پیوندهای در راستای Y با طول پیوند $1/42 \text{ \AA}$ هستند. مقادیر محاسبه شده ی ϵ_L و ϵ_H برای این نانو پولک به ترتیب $-1/433$ و $-6/515$ الکترون ولت هستند و مقدار HLG نیز $5/803 \text{ eV}$ محاسبه گردید. همچنین مقادیر تابع کار و الکترون دوستی این نانو پولک برابر با $7/948$ و $1/554$ الکترون ولت می باشند. بنابراین نانو پولک مورد بررسی یک نیمه رسانا می باشد. مقدار بزرگی فراقطبش پذیری به همراه مولفه های محاسبه شده نیز در جدول (۲) گردآوری شده است. مقدار بدست آمده از روش LC-BLYP برابر با $2987/31 \text{ au}$ و از روش BHandHLYP برابر با $3884/80 \text{ au}$ هستند.



شکل ۱- ساختار هندسی بهینه شده نانو پولک $C_{46}H_{18}$

در ادامه جایگزین کردن یکی از حلقه های بنزنی با یک حلقه B_3N_3 در نانو پولک مورد بررسی قرار گرفت. در نتیجه این فرایند نانو پولک های $C_{40}B_3N_3H_{18}$ بدست می آیند. هدف آن است که تاثیر این جایگزینی بر روی شکاف HOMO-LUMO و اولین فراقطبش پذیری بررسی گردد. لازم به ذکر است که این جایگزینی می تواند در الگوهای متفاوتی صورت گیرد. بدین منظور الگوهای متفاوت و متمایزی طراحی گردید و ساختار هندسی آنها در سطح محاسباتی B3LYP/6-31G(d) بهینه سازی شدند. ساختار هندسی الگوهای بهینه سازی شده در شکل (۲) نشان داده شده است.

جایگزینی یک حلقه‌ی B_3N_3 با حلقه‌ی کربنی که در راستای X در رأس قرار دارد به دو صورت امکان پذیر است. یک حلقه B_3N_3 به صورتی می‌تواند جانشین شود که اتم بور در راستای X در رأس قرار گیرد و یا اتم نیتروژن در رأس این راستا باشد. این جایگزینی‌ها منجر به ایجاد الگوهای A و B در شکل (۲) می‌گردند. در ردیف دوم در راستای X از نانوپولک دو حلقه وجود دارد که جایگزین کردن یکی از این حلقه‌ها با B_3N_3 انجام شده است. با توجه به شکل (۲) در الگوی C، اتم بور در راستای X در رأس قرار گرفته و در الگوی D اتم نیتروژن در رأس این راستا است. در ردیف سوم این نانو پولک سه حلقه وجود دارد که جایگزینی در حلقه اول و دوم می‌تواند صورت گیرد تا الگوهای متمایزی ایجاد شود. الگوهای E و F در شکل (۲) از جایگزینی حلقه اول با حلقه B_3N_3 بدست آمده است بطوریکه در آنها به ترتیب اتم‌های بور و نیتروژن در راس راستای X قرار دارند. در الگوهای G و H نیز حلقه دوم با حلقه B_3N_3 جایگزین شده است بصورتی که در آنها به ترتیب اتم‌های B بور و نیتروژن در رأس راستای X هستند. ذکر این نکته ضروری است که جایگزینی در حلقه‌های ردیف چهارم و پنجم منجر به ایجاد ساختار جدید و متمایزی نمی‌شود. به عنوان مثال با جایگزین کردن اولین حلقه ردیف چهارم با حلقه B_3N_3 و چرخاندن 120° نانو پولک به الگوهای B و یا C می‌رسیم و بنابراین ساختار متمایزی ایجاد نمی‌گردد. در نتیجه هشت الگوی متفاوت از نانو پولک $C_{40}B_3N_3H_{18}$ بدست آمد. در ادامه به بررسی خواص الکترونی و نوری غیر خطی آنها می‌پردازیم تا تاثیر نحوه‌ی قرار گیری حلقه B_3N_3 مورد ارزیابی قرار گیرد.

مقادیر انرژی‌های \mathcal{E}_H و \mathcal{E}_L برای این نانو پولک‌ها به‌مراه مقادیر HLG و تابع کار (ϕ) و الکترون دوستی (ω) آنها محاسبه گردیده و در جدول (۱) گردآوری شده است. همچنین مقدار تغییرات این کمیت‌های الکترونی (ΔIn) نانوپولک‌های جانشین شده نسبت به نانوپولک $C_{46}H_{18}$ بر اساس معادله (۷) محاسبه گردیده است و در این جدول ذکر شده اند.

$$\% \Delta In = \frac{In_{C_{40}B_3N_3H_{18}} - In_{C_{46}H_{18}}}{In_{C_{46}H_{18}}} \times 100 \quad (7)$$

که در معادله (۷)، In بیانگر هر یک از کمیت‌های الکترونی HLG و تابع کار (ϕ) و الکترون دوستی (ω) می‌باشد. بر اساس نتایج جدول (۱) مشاهده می‌گردد که جانشین نمودن حلقه B_3N_3 مقدار HLG اندکی افزایش می‌یابد. که این افزایش ناشی از تغییر اندک در سطوح HOMO و LUMO می‌گردد. علاوه بر این مقادیر الکترون دوستی این نانوپولک‌ها نسبت به نانوپولک $C_{46}H_{18}$ اندکی کاهش یافته است. بیشترین میزان کاهش مربوط به ساختار F می‌باشد، که مقدار ω آن به $1/322$ eV رسیده است. مقادیر محاسبه شده‌ی تابع کار در جدول (۱) نشان می‌دهند که تغییرات در تابع کار نانوپولک‌های جانشین شده نسبت به نانوپولک $C_{46}H_{18}$ ناچیز می‌باشند. در ساختارهای A، B، D، F و H مقادیر تابع کار اندکی کاهش یافته اند ولی در ساختارهای C، G و E تابع کار به طور جزئی افزایش یافته است. پایداری سینتیکی این نانوساختارها در ارتباط با مقدار HLG آنها می‌باشد. بدلیل مقدار HLG زیاد این نانوساختارها در حدود 5 eV این نانوپولک‌ها دارای پایداری سینتیکی هستند. علاوه

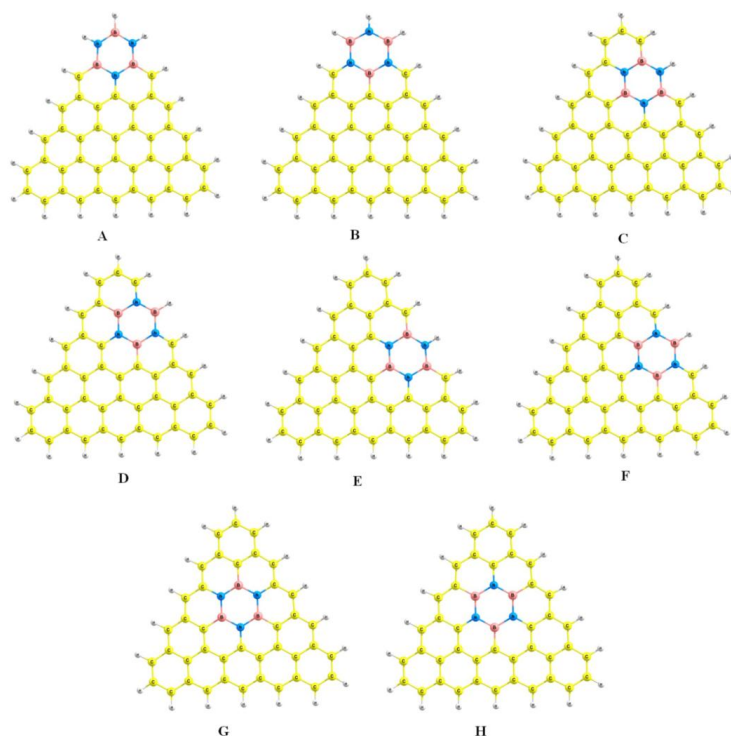
بر این جهت مطالعه پایداری ترمودینامیکی آنها، انرژی نانو ساختارهای $C_{40}B_3N_3H_{18}$ در جدول (۱) گزارش شده است. تفاوت پایداری آنها نسبت به پایدارترین نانو پولک (A) در حدود 0.3% تا 0.5% واحد اتمی می باشد. بنابراین نتایج بدست آمده نشان می دهند که جایگزینی حلقه B_3N_3 در نانوپولک مورد بررسی خصلت الکترونی نانوپولک را به طور جزئی تحت تاثیر قرار می دهد.

جدول ۱- مقادیر انرژی های انرژی های مطلق (E)، HOMO، LUMO، شکاف (HLG)HOMO-LUMO، تابع کار (ϕ) و الکترون دوستی (ω) بر حسب eV و درصد تغییرات نسبی آنها برای نانوپولک های مورد بررسی.

ترکیبات	E (au)	ϵ_L	ϵ_H	HLG	% Δ HLG	ϕ	% Δ ϕ	ω	% Δ ω
$C_{46}H_{18}$	-	-1.433	-6.515	5.083	-	7.948	-	1.554	-
A	-1769.2462	-1.404	-6.492	5.088	0.10	7.896	0.65	1.532	1.42
B	-1769.2170	-1.310	-6.396	5.085	0.04	7.706	3.04	1.459	6.07
C	-1769.1958	-1.398	-6.552	5.153	1.38	7.950	0.03	1.533	1.35
D	-1769.2165	-1.104	-6.435	5.332	4.90	7.539	5.15	1.333	14.23
E	-1769.2378	-1.241	-6.724	5.483	7.87	7.965	0.21	1.446	6.92
F	-1769.2137	-1.057	-6.598	5.542	9.03	7.655	3.69	1.322	14.92
G	-1769.2061	-1.309	-6.789	5.480	7.81	8.098	1.89	1.496	3.73
H	-1769.2052	-1.152	-6.530	5.378	5.80	7.682	3.35	1.370	11.72

لازم به ذکر است که انتخاب روش مناسب جهت محاسبه فراقطبش پذیری امری مخاطره آمیز است. روش اختلالی مولر-پلست (MP2) روشی مناسب جهت این محاسبات است اما استفاده از این روش در محاسبات فراقطبش پذیری سیستم های بزرگ بسیار هزینه بر و گران است. از سوی دیگر روش های معمول DFT نظیر روش B3LYP مقادیر فراقطبش پذیری را بیش از مقدار واقعی تخمین می زند. از آنجا که در این محاسبات یک برهمکنش ضعیف میدان الکتریکی و مولکول مورد نظر است، استفاده از روش های DFT که دارای تصحیحات نیروهای دوربرد هستند توصیه شده اند. در این پژوهش از روش های LC-BLYP و BHandHLYP که از روش های DFT که با تصحیحات نیروهای دوربرد می باشند، استفاده شده است. مقادیر مولفه های فراقطبش پذیری به همراه مقدار بزرگی آن در سطح های محاسباتی LC-BLYP/6-311G(d) و BHandHLYP/6-311G(d) محاسبه شده اند و در جدول (۲) گردآوری شده اند. مقدار اولین فراقطبش پذیری برای نانو پولک $C_{46}H_{18}$ برابر با $2987/31$ au و $3884/80$ au با روش های به ترتیب LC-BLYP و BHandHLYP بدست آمده است. نتایج موجود در جدول (۲) نشان می دهد که در ساختارهای A، C، D، E، F و G مقدار فراقطبش پذیری کمتر از نانوپولک خالص $C_{46}H_{18}$ است. این در حالی است که در نانوپولک $C_{40}B_3N_3H_{18}$ با الگوی B مقدار فراقطبش پذیری نزدیک به ۳ برابر بیش از نانوپولک خالص $C_{46}H_{18}$ است. در الگوهای C و H نیز مقدار β_0 به $1/5$ برابر بیشتر نانوپولک خالص است. بنابراین نانوپولکی که در آن که اتم نیتروژن در راستای X در رأس پولک قرار گیرد، دارای بیشترین مقدار اولین فراقطبش پذیری در میان نانوپولک های مورد بررسی می باشد. بنابراین با چنین تغییری در ساختار نانوپولک کربنی و وارد کردن حلقه بور-نیتريدی مطابق الگوی B مقدار فراقطبش پذیری به طور چشمگیری افزایش می یابد. در ادامه این مطالعه پیشنهاد می گردد اثر

جایگزینی دیگر گروه‌ها نظیر AIN و BP در این نانوپولک‌ها بررسی شود. همچنین پیشنهاد می‌شود تا نانوپولک‌های با اشکال دیگر نظیر بیضوی، مربعی و مستطیلی بررسی گردد.

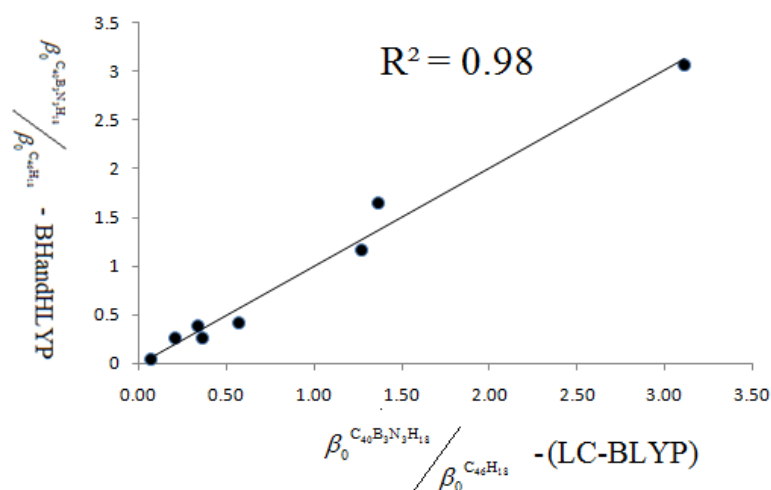


شکل ۲- ساختارهای هندسی بهینه شده‌ی الگوهای نانو پولک $C_{40}B_3N_3H_{18}$

جدول ۲- مقادیر مولفه‌ها و بزرگی اولین فراقطبش پذیری و نسبت تغییرات برای نانوپولک‌های مورد بررسی بر حسب واحد اتمی (au) با استفاده از روش‌های LC-BLYP و BHandHLYP.

ترکیبات	β_x	β_y	β_z	β_0	$\beta_0^{C_{40}B_3N_3H_{18}} / \beta_0^{C_{46}H_{18}}$
LC-BLYP					
$C_{46}H_{18}$	-1581.5	-2534.3	0.0	2987.3	-
A	1086.4	0.0	0.0	1086.4	0.36
B	9289.53	0.1	0.0	9289.5	3.11
C	2923.2	-2855.2	0.0	4086.2	1.37
D	543.3	1633.0	0.0	1721.1	0.58
E	134.9	166.7	0.0	214.5	0.07
F	-628.5	-5.0	0.0	628.5	0.21
G	-1011.2	0.0	0.0	1011.2	0.34
H	0.0	0.0	3800.4	3800.4	1.27
BhandHLYP					
$C_{46}H_{18}$	-2249.1	-3167.5	0.0	3884.8	-
A	-987.6	0.0	0.0	987.6	0.25
B	11920.8	0.1	0.0	11920.8	3.07
C	3937.6	-5068.1	0.0	6417.9	1.65
D	1109.0	1096.6	0.0	1559.6	0.40
E	115.3	-59.1	0.0	129.6	0.03
F	-1002.8	-5.8	0.0	1002.9	0.26
G	-1489.6	0.00	0.0	1489.6	0.38
H	0.0	0.0	4535.0	4535.0	1.17

ذکر این نکته ضروری است که هر چند مقادیر محاسبه شده ی مطلق فراقطبش پذیری برای هر ساختار با استفاده از دو روش اشاره شده، با یکدیگر اختلاف دارند، اما باید نسبت تغییرات فراقطبش پذیری مربوط به نانوپولک خالص و نانوپولک های جانشین شده را مورد بررسی قرار داد. بدین منظور مقادیر نسبت فراقطبش پذیری نانوپولک های $C_{40}B_3N_3H_{18}$ نسبت به نانوپولک خالص $C_{46}H_{18}$ ($\beta_0^{C_{40}B_3N_3H_{18}} / \beta_0^{C_{46}H_{18}}$) برای هر دو روش مورد بررسی در جدول (۲) گرد آوری شده است. نتایج نشان می دهند که این نسبت های به دست آمده از هر دو روش روند و مقادیر تقریباً مشابهی را نشان می دهند. نمودار تطابق این نسبت ها در شکل (۳) نشان داده شده است که دارای ضریب همبستگی ۰/۹۸ هستند. بنابراین علی رغم اینکه مقادیر مطلق فراقطبش پذیری با دو روش با یکدیگر اختلاف دارند ولی نسبت تغییرات آنها در نانوپولک های جانشین شده نسبت به نانو پولک خالص تفاوت چشمگیری با یکدیگر ندارد و نتایج مشابهی ارائه می دهند.



شکل ۳- نمودار تطابق نسبت تغییرات فراقطبش پذیری بدست آمده از هر دو روش مورد بررسی

۴- نتیجه گیری

خواص نوری غیرخطی و الکترونی نانو پولک های مثلثی کربنی-بور-نیتتریدی ($C_{40}B_3N_3H_{18}$) بوسیله استفاده از محاسبات نظریه تابعیت چگالی (DFT) بررسی شده اند. نانوپولک کربنی $C_{46}H_{18}$ در نظر گرفته شده و یک حلقه B_3N_3 در این نانوپولک با الگوهای مختلف جایگزین شدند و خواص الکترونی و نوری غیرخطی آنها مطالعه شدند. نتایج بدست آمده حاکی از آن است که علی رغم اینکه خواص الکترونی تحت تاثیر این جایگزینی قرار نمی گیرد ولی پاسخ نوری غیرخطی آن در حالتی که یا اتم نیتروژن در رأس نانوپولک واقع شود، بطور چشمگیری افزایش می یابد. این نتایج در توافق با نتایج تجربی و نظری پیرامون نانو ساختارها کربنی-بور-نیتتریدی می باشند [۲۹-۳۵].

تشکر و قدردانی

این تحقیق با حمایت گروه شیمی دانشگاه شهید چمران اهواز انجام شده است که بدینوسیله نویسنده این مقاله، صمیمانه تقدیر و تشکر می نماید.

۵- منابع

- [1] S. Muhammad, H.L. Xu, R.L. Zhong, Z.M. Su, A.G. Al-Sehemi, and A. Irfan, *J. Mater. Chem. C*, **1** (2013) 5439.
- [2] F. Ma, and Z.J. Zhou, *ChemPhysChem* **13** (2012) 1307.
- [3] F. Ma, Z.R. Li, Z.J. Zhou, D. Wu, Y. Li, Y.F. Wang, and Z.S. Li, *J. Phys. Chem. C* **114** (2010) 11242.
- [4] E. Shakerzadeh, Z. Biglari, and E. Tahmasebi, *Chem. Phys. Lett.* **654** (2016) 76.
- [5] E. Shakerzadeh, E. Tahmasebi, and Z. Biglari, *J. Mol. Liquid* **221** (2016) 443.
- [6] M. Solimannejad, S. Kamalinahad, and E. Shakerzadeh, *B Chem. Soc. Jpn.* **6** (2016) 692.
- [7] R.L. Zhong, H.L. Xu, S. Muhammad, J. Zhang, and Z.M. Su, *J. Mater. Chem.* **22** (2012) 2196.
- [8] D.F. Eaton, *Science* **253** (1991) 281.
- [9] E. Tahmasebi, E. Shakerzadeh, and Z. biglari, *Appl. Surf. Sci.* **363** (2016) 197.
- [10] C. Tu, G. Yu, G. Yang, X. Zhao, W. Chen, S. Lia, and X. Huang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** (2014) 1597.
- [11] Z.J. Zhou, G.T. Yu, F. Ma, X.R. Huang, Z.J. Wu, and Z.R. Li, *J. Mater. Chem. C*. **2** (2014) 306.
- [12] S. Muhammad, H. Xu, and Z. Su, *J. Phys. Chem. A* **115** (2011) 923.
- [13] Y.Y. Hu, S.L. Sun, S. Muhammad, H.L. Xu, and Z.M. Su, *J. Phys. Chem. C* **114** (2010) 19792.
- [14] H.Q. Wu, R.L. Zhong, S.L. Sun, H.L. Xu, and Z.M. Su, *J. Phys. Chem. C* **118** (2014) 6952.
- [۱۵] د. فرمان زاده، ح. رضایی نژاد، دانشگاه سمنان، مجله اندیشه علوم، مقالات آماده انتشار، شناسه دیجیتال (DOI): 10.22075/chem.2017.2390
- [۱۶] ع. عرب، ف. گبل، دانشگاه سمنان، مجله اندیشه علوم، شماره ۳۴ (۱۳۹۴)، ۳۵.
- [17] F. Li, Y. Zhang, and H.S. Chen, *Physica E* **56** (2014) 216.
- [18] R.L. Zhong, S.L. Sun, H.L. Xu, Y.Q. Qiu, Z.M. and Su, *J. Phys. Chem. C* **117** (2013) 10039.
- [19] L. Maya, and L.A. Harris, *J. Am. Ceram. Soc.* **73** (1990) 1912.
- [20] M. Terrones, A.M. Benito, C. Manteca-Diego, W.K. Hsu, O.I. Osman, J.P. Hare, D.G. Reid,
- [21] H. Terrones, A.K. Cheetham, K. Prassides, H.W. Kroto, and D.R.M. Walton, *Chem. Phys. Lett.* **257** (1996) 576.
- [22] I. Montero, and L. Galán, *J. Mater. Res.* **12** (1997) 1563.

- [23] Y. Zhang, H. Gu, K. Suenaga, and S. Iijima, *Chem. Phys. Lett.* **279** (1997) 264.
- [24] J. Yu, X.D. Bai, J. Ahn, S.F. Yoon, and E.G. Wang, *Chem. Phys. Lett.* **323** (2000) 529.
- [25] F.L. Huang, C.B. Cao, X. Xiang, R.T. Lv, and H.S. Zhu, *Diam. Relat. Mater.* **13** (2004) 1757.
- [26] K. Hossein, E. Shakerzadeh, M. Bamdad, *J. Mol. Liquids* **233** (2017) 236.
- [27] A.D. Buckingham, *Adv. Chem. Phys.* **12** (1967) 107.
- [28] A.D. Mclean, M. Yoshimine, *J. Chem. Phys.* **47** (1967) 1927.
- [29] H. Sekino, Y.M.M Kamiya, K. Hirao, *J. Chem. Phys.* **126** (2007) art. 184104, DOI: 10.1063/1.2885051.
- [30] O. Stephan, P.M. Ajayan, C. Colliex, P. Redlich, J.M. Lambert, P. Bernier, P. Lefin, *Science* **266**, (1994) 1683.
- [31] Z.W. Sieh, K. Cherrey, N.G. Chopra, X. Blase, Y. Miyamoto, A. Rubio, M.L. Cohen, S. Louie, G. Zettl, A. Gronsky, *Phys. Rev. B* **51** (1995) 11229.
- [32] S. Enouz, O. Stéphan, J.L. Cochon, C. Colliex, A. Loiseau, *Nano Lett.* **7** (2007) 1856.
- [33] V.V. Ivanovskaya, A. Zobelli, O. Stéphan, P.R. Briddon, C. Colliex, *J. Phys. Chem. C* **113** (2009) 16603.
- [34] A. Du, Y. Chen, Z. Zhu, G. Lu, S.C. Smith, *J. Am. Chem. Soc.* **131** (2009) 1682.
- [35] Z.Y. Zhang, Z. Zhang, W. Guo, *J. Phys. Chem. C* **113** (2009) 13108.