



Original Article

Theoretical Design and Analysis of the Structure, Electrical and Optical Properties of Nanobuds Composed of B₃₆ and C₂₀ Using the DFT Method

Samaneh Soleymani , Hamid Reza Shamlouei* , Zeinab Biglari

Faculty of Chemistry, Lorestan University, Khorramabad, Iran

Received: 2025-07-13

Revised: 2025-10-18

Accepted: 2025-11-06

Abstract: In this study, by grafting a two-dimensional nanostructure of bruphene (B₃₆) onto C₂₀ fullerene, nanobuds with novel structures were designed and their stability was investigated using theoretical calculations based on density functional theory (DFT). In order to evaluate the stability and feasibility of forming these nanostructures, geometric structure optimization, vibrational spectrum (IR) analysis, and binding energy calculation were performed. The electronic properties of these nanobuds, including the energy of the HOMO and LUMO frontier orbitals and the energy gap (Eg), were determined using the density of states (DOS) spectrum. The results show that the designed nanobuds exhibit better electrical properties compared to the original molecules. Analysis of the electronic charge distribution also showed that the nanobuds have a dipolar characteristic, such that the part containing B₃₆ has a partial positive charge and the part consisting of C₂₀ has a partial negative charge. Finally, in order to investigate the optical potential of these nanostructures, their linear and nonlinear optical properties were calculated and it was found that the B₃₆ to C₂₀ linkage leads to a significant improvement in their optical response. The feasibility of forming nanobuds from B₃₆ and C₂₀ and creating boron-carbon nanobuds was investigated in this research and it was shown that these nanobuds, especially the B configuration, have suitable electronic, optical and thermodynamic properties that raise hopes for their application in photonics, optoelectronics and nanotechnology.

Keywords: Nanobud, B₃₆, C₂₀ fullerene, density functional theory, electrical properties, nonlinear optical properties

*Corresponding Author. Email: shamlouei.ha@lu.ac.ir

How to Cite This Article:

Soleymani, S, Shamlouei, H R, Biglari, Z. Theoretical Design and Analysis of the Structure, Electrical and Optical Properties of Nanobuds Composed of B₃₆ and C₂₀ Using the DFT Method. Nanomeghyas. 2025; 12(3): 287-301. DOI: [10.22034/ns.2025.2065651.1398](https://doi.org/10.22034/ns.2025.2065651.1398)





طراحی نظری و تحلیل ساختار، خواص الکتریکی و نوری نانوغنچه‌های تشکیل شده از B_{36} و C_{20} با استفاده از روش DFT

سمانه سلیمانی ^{ID}، حمیدرضا شاملویی* ^{ID}، زینب بیگلری ^{ID}

دانشکده شیمی، دانشگاه لرستان، خرم آباد، ایران

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۸/۱۵

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۴/۰۷/۲۶

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۴/۲۲

چکیده: در این پژوهش، با پیوند نانوساختار دوبعدی بروفن (B_{36}) بر روی فولرن C_{20} ، نانوغنچه‌هایی با ساختارهای نوین طراحی شده و پایداری آن‌ها با استفاده از محاسبات نظری بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور ارزیابی پایداری و امکان‌پذیری تشکیل این نانوساختارها، بهینه‌سازی ساختار هندسی، تحلیل طیف ارتعاشی (IR) و محاسبه انرژی پیوستگی انجام شد. ویژگی‌های الکترونی این نانوغنچه‌ها از جمله انرژی اوربیتال‌های مرزی HOMO و LUMO و نیز شکاف انرژی (Eg) با استفاده از طیف چگالی حالات (DOS) تعیین گردید. نتایج نشان می‌دهد که نانوغنچه‌های طراحی شده در مقایسه با مولکول‌های اولیه، خواص الکتریکی بهتری از خود نشان می‌دهند. تحلیل توزیع بار الکترونی نیز نشان داد که نانوغنچه‌ها دارای ویژگی دوقطبی هستند، به گونه‌ای که بخش حاوی B_{36} دارای بار مثبت جزئی و بخش متشکل از C_{20} دارای بار منفی جزئی است. در نهایت، به منظور بررسی پتانسیل نوری این نانوساختارها، خواص نوری خطی و غیرخطی آن‌ها محاسبه شد و مشخص گردید که پیوند B_{36} به C_{20} منجر به بهبود قابل توجه پاسخ نوری آن‌ها می‌شود. امکان‌سنجی تشکیل نانوغنچه‌ها از B_{36} و C_{20} و ایجاد نانوغنچه‌های بور-کربن در این تحقیق بررسی شد و نشان داده شد که این نانوغنچه‌ها، به ویژه پیکربندی B، خواص الکترونیکی، نوری و ترمودینامیکی مناسبی دارند که امیدهایی را برای کاربرد آنها در فوتونیک، اپتوالکترونیک و نانوفناوری ایجاد می‌کند.

واژگان کلیدی: نانوغنچه، B_{36} ، فولرن C_{20} ، تئوری تابعی چگالی، خواص الکتریکی، خواص نوری غیرخطی

* نویسنده مسئول. ایمیل: shamlouei.ha@lu.ac.ir

نحوه استناد به این مقاله:

سلیمانی، سمانه، شاملویی، حمیدرضا، بیگلری، زینب. طراحی نظری و تحلیل ساختار، خواص الکتریکی و نوری نانوغنچه‌های تشکیل شده از B_{36} و C_{20} با استفاده از روش DFT. *نانو مقیاس*، ۲۰۲۵، ۱۲(۳)، ۲۸۷-۳۰۱.

DOI: [10.22034/ns.2025.2065651.1398](https://doi.org/10.22034/ns.2025.2065651.1398)



۱- مقدمه

کربن به عنوان یکی از عناصر اصلی تشکیل دهنده حیات، دارای آلوتروپ‌های متنوعی همچون گرافیت، الماس، فولرن‌ها و نانولوله‌های کربنی است. فولرن‌ها دسته‌ای از آلوتروپ‌های کربن با ساختار مولکولی قفس‌مانند هستند که از ترکیب اتم‌های کربن در قالب حلقه‌های پنج‌ضلعی و شش‌ضلعی تشکیل شده‌اند. کشف باکمینستر فولرن (C_{60}) در سال ۱۹۸۵ توسط کروتو و همکارانش [۱] نقطه عطفی در شیمی کربن به شمار می‌رود. این کشف، مسیر تازه‌ای را برای مطالعه و توسعه ساختارهای نانومتری کربنی فراهم کرد و به گسترش تحقیقات در حوزه نانوفناوری انجامید. فولرن C_{60} که به دلیل ساختار کروی خود به توپ فوتبال شهرت یافته، پایدارترین و شناخته‌شده‌ترین عضو این خانواده محسوب می‌شود. علاوه بر آن، فولرن‌هایی با تعداد متفاوتی از اتم‌های کربن مانند C_{70} ، C_{76} و C_{84} نیز شناسایی شده‌اند که ساختارهای هندسی گوناگونی دارند [۲]. ویژگی‌هایی چون پایداری شیمیایی بالا، رسانایی الکتریکی، خواص مکانیکی و نوری منحصربه‌فرد، و قابلیت عامل‌دار شدن، فولرن‌ها را به مواد مناسبی برای کاربردهای متنوع در زمینه‌های دارورسانی، حسگرها، فوتوالکترونیک و مواد پیشرفته تبدیل کرده‌اند [۳]. همچنین، نانولوله‌های کربنی که به‌عنوان ساختارهای استوانه‌ای مشتق شده از فولرن‌ها در نظر گرفته می‌شوند، دارای خواص مکانیکی، الکترونیکی و حرارتی فوق‌العاده‌ای هستند. این ساختارها به دلیل واکنش‌پذیری نسبتاً پایین و قابلیت کنترل‌پذیر در عامل‌دار شدن، توجه فراوانی را در حوزه‌های نانوکامپوزیت‌ها، الکترونیک مولکولی و پزشکی به خود جلب کرده‌اند [۴ و ۵].

آلوتروپ‌های کربنی نظیر نانولوله‌های کربنی (CNTs) و فولرن‌ها از دهه‌های پایانی قرن بیستم به عنوان ساختارهای نانومتری شناخته شده‌اند. با این حال، ترکیب این دو ساختار به صورت نانوساختارهای هیبریدی موسوم به نانوغنچه‌ها (NBs) که برای

نخستین بار توسط ناسیبولین و کاوپینن معرفی شدند [۶]، منجر به شکل‌گیری موادی با ویژگی‌های منحصربه‌فرد شده است. در این نانوساختارها، فولرن‌ها به‌صورت کووالانسی به دیواره‌های جانبی نانولوله‌های کربنی متصل می‌شوند، که حاصل آن ساختاری ترکیبی با ویژگی‌های هم‌زمان CNT و فولرن است. این اتصال موجب بهبود خواص الکتریکی، مکانیکی و شیمیایی ماده نهایی می‌شود. رسانایی الکتریکی و استحکام مکانیکی این ساختارها مشابه نانولوله‌های کربنی است، در حالی که فولرن‌های متصل‌شده در سطح بیرونی، دارای واکنش‌پذیری بالاتری هستند و می‌توانند از طریق روش‌های کلاسیک شیمی فولرن عامل‌دار شوند. از این طریق، امکان تنظیم خواص مواد کامپوزیتی حاصل نیز فراهم می‌شود. با وجود گذشت بیش از یک دهه از معرفی این ساختارها، گزارش‌های منتشرشده در مورد NBها همچنان محدود است و از این‌رو، این نانوساختارها به‌عنوان موادی کمتر شناخته‌شده در حوزه نانوفناوری در نظر گرفته می‌شوند [۷].

نانوغنچه‌ها ساختارهای نانومقیاسی هیبریدی هستند که از ترکیب دو آلوتروپ کربنی، یعنی نانولوله‌های کربنی و فولرن‌ها، تشکیل شده‌اند. این نانوساختارها به دلیل ترکیب خواص الکتریکی و مکانیکی برتر نانولوله‌ها و واکنش‌پذیری بالای فولرن‌ها، توجه گسترده‌ای را در زمینه نانوفناوری به خود جلب کرده‌اند [۸ و ۹]. اتصال کووالانسی فولرن‌ها به دیواره‌های جانبی نانولوله‌ها، نقش لنگر مولکولی ایفا می‌کند که از لغزش نانولوله‌ها در ماتریس‌های کامپوزیتی جلوگیری کرده و استحکام مکانیکی آن‌ها را افزایش می‌دهد [۱۰]. علاوه بر این، ساختار منشعب و سطح بالای نانوغنچه‌ها موجب شده تا این ساختارها برای کاربردهای کاتالیز، حسگری و فوتوالکترونیک بسیار مناسب باشند [۱۱]. بسته به نوع ترکیب و ساختار، نانوغنچه‌ها می‌توانند خواص الکتریکی متنوعی از جمله رسانایی، نیمه‌رسانایی یا عایقی نشان دهند و قابلیت جذب و نشر نور در برخی از آن‌ها، کاربردهای بالقوه‌ای در سلول‌های خورشیدی

و دستگاه‌های نوری ایجاد کرده است [۱۲]. همچنین، قابلیت عملکردی‌سازی سطحی نانوغنچه‌ها، آن‌ها را به گزینه‌های مناسبی برای کاربردهای دارورسانی هدفمند تبدیل کرده است [۱۳]. در حوزه انرژی، ساختار منشعب نانوغنچه‌ها باعث افزایش جذب نور و بهبود انتقال حامل‌های بار در سلول‌های خورشیدی شده که منجر به افزایش بازدهی آن‌ها می‌گردد [۱۴].

نانومواد دوبعدی (2D) دسته‌ای شگفت‌انگیز از نانومواد هستند که ویژگی‌های منحصر به فرد و گسترده‌ای را ارائه می‌دهند. این مواد پتانسیل بالایی برای کاربرد در حسگرهای الکتروشیمیایی، حسگرهای گازی، باتری‌ها، خازن‌ها، فتوکاتالیست‌ها و دستگاه‌های خورشیدی دارند [۱۵]. کشف گرافن، با ساختار لایه‌ای دوبعدی و خصوصیات برجسته‌ای نظیر سطح ویژه بالا، تحرک الکترون فوق‌العاده، هدایت حرارتی بالا و انعطاف‌پذیری چشمگیر، نقطه عطفی در شناسایی و توسعه نانومواد دوبعدی محسوب می‌شود [۱۶]. توجه فراوان به گرافن موجب شده است که علاقه محققان به کشف و مطالعه دیگر مواد دوبعدی افزایش یابد. تاکنون انواع مختلفی از نانومواد دوبعدی، شامل فسفرن، بوروفن، ژرمانن، $g-C_3N_4$ ، چارچوب‌های فلزی-آلی (MOFs)، چارچوب‌های آلی کووالانسی (COFs)، آنتی‌مونن، نانورق‌های فوق نازک دی‌سولفید مولیبدن (MoS_2) و سیلیکون، به صورت تجربی سنتز و مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۱۷]. تحقیقات و تلاش‌ها برای یافتن و توسعه نانومواد دوبعدی با ویژگی‌های مناسب جهت کاربردهای پیشرفته در حوزه‌های مختلف فناوری، همچنان ادامه دارد.

بور، اولین عنصر گروه ۱۳ و متعلق به دوره دوم جدول تناوبی، یک عنصر غیرفلزی سبک‌وزن با خواص فیزیکی و شیمیایی متمایز و تنوع شیمیایی گسترده است [۱۸]. این عنصر دارای سه الکترون ظرفیتی بوده و به دلیل تمایل بالایش به تشکیل پیوند با اتم‌های بور دیگر، ساختارهای خوشه‌ای و قفس‌مانندی را برای جبران کمبود الکترون‌های

مورد نیاز جهت تکمیل هشت‌گانه خود تشکیل می‌دهد [۱۹]. ترکیبات غیرآلی مبتنی بر بور به دلیل وزن سبک و خواص ویژه، توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۲۰]. در میان نانومواد مبتنی بر بور، بوروفن به عنوان یک آلوتروپ دوبعدی با ساختاری پیچیده و متنوع، جایگاه ویژه‌ای یافته است. برخلاف گرافن که از شبکه‌ای منظم و یکنواخت شش‌ضلعی اتم‌های کربن تشکیل شده، ساختار اتمی بوروفن شامل ترکیبی از حلقه‌های شش‌ضلعی، پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی است که موجب تنوع ساختاری و خواص منحصر به فرد آن می‌شود [۲۱]. این تنوع ساختاری، طیف گسترده‌ای از خواص الکتریکی از رسانایی فلزی گرفته تا نیمه‌رسانایی و حتی ابررسانایی را در بوروفن ایجاد کرده است [۲۲]. علاوه بر این، بوروفن از نظر مکانیکی انعطاف‌پذیری بالایی دارد و خواص مغناطیسی و واکنش‌پذیری قابل توجهی از خود نشان می‌دهد [۲۳]. خواص فیزیکی نانوساختارهای بوروفنی به مورفولوژی، تعداد لایه‌ها و تغییرات ساختاری وابسته است. پیوندهای کووالانسی و انواع پیوندهای چندمرکزی در بوروفن سبب ایجاد تنوع ساختاری و پایداری بالای این ماده می‌شود. در پیوندهای چندمرکزی، چند اتم با تعداد مشخصی الکترون به جبران کمبود الکترونی کمک می‌کنند و ساختارهای متنوعی را ممکن می‌سازند [۲۴ و ۲۵]. ساختار و پیوندهای منحصر به فرد بوروفن مسئول برخی خواص برجسته آن از جمله هدایت حرارتی بالا، ناهمسانگردی ساختاری مطلوب، چگالی کم، سختی و نقطه ذوب بالا و پدیده ابررسانایی است [۲۶].

بوروفن، به عنوان آلوتروپ دوبعدی بور، ویژگی‌های الکترونیکی متفاوتی نسبت به بور سه‌بعدی نشان می‌دهد. در حالی که بور سه‌بعدی عمدتاً رفتار نیمه‌رسانایی از خود به نمایش می‌گذارد، بوروفن رفتار فلزی قابل توجهی دارد که در بسیاری از نانومواد دوبعدی دیگر کمتر مشاهده می‌شود [۲۷ و ۲۸]. این ویژگی فلزی بودن بوروفن، آن را به کاندیدای مناسبی برای کاربردهای پیشرفته از جمله باتری‌های یونی قابل شارژ، ذخیره‌سازی هیدروژن و

شده (E_{HOMO}) و انرژی کمترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (E_{LUMO}) به عنوان معیارهای اصلی برای بررسی خواص الکتریکی مولکول‌ها در نظر گرفته شدند. این دو انرژی نقش مهمی در تعیین رفتار و پایداری مولکول‌ها دارند. علاوه بر این، پارامترهای مهم دیگری مانند سختی شیمیایی (η)، پتانسیل شیمیایی (μ)، الکتروفیلی (ω)، کشش یونیزاسیون (I)، میل ترکیبی الکترون (A) و الکترون‌گاتیوی (χ) نیز محاسبه شده‌اند. با توجه به تعریف نظریه تابع چگالی، الکترون‌گاتیوی برابر منفی پتانسیل شیمیایی ($\chi = -\mu$) است. بنابراین، فرمول χ مشابه μ بوده ولی با علامت منفی بیان می‌شود. روابط این پارامترها به شرح معادلات (۲) تا (۷) می‌باشند [۳۴].

$$\eta = \frac{E_{LUMO} - E_{HOMO}}{2} \quad (2)$$

$$\mu = \frac{E_{HOMO} + E_{LUMO}}{2} \quad (3)$$

$$\omega = \frac{i^2}{2} \quad (4)$$

$$I = -E_{HOMO} \quad (5)$$

$$A = -E_{LUMO} \quad (6)$$

$$\chi = -\frac{E_{HOMO} + E_{LUMO}}{2} \quad (7)$$

انرژی یک سیستم در حضور میدان الکتریکی ضعیف و یکنواخت را می‌توان طبق معادله (۸) بیان کرد [۳۵ و ۳۶].

$$E = E^0 - \mu_{\alpha} F_{\alpha} - 1/2 \alpha_{\alpha\beta} F_{\alpha} F_{\beta} - 1/6 \beta_{\alpha\beta\gamma} F_{\alpha} F_{\beta} F_{\gamma} - \dots \quad (8)$$

که در آن E^0 کل انرژی مولکولی بدون میدان الکتریکی و F_{α} جزء میدان الکتریکی در امتداد جهت α است. μ_{α} ، $\alpha_{\alpha\beta}$ و $\beta_{\alpha\beta\gamma}$ به ترتیب نشان دهنده دوقطبی،

حسگرهای دقیق تبدیل کرده است [۲۹ و ۳۰]. ماهیت الکترونیکی منحصر به فرد بوروفن، که برخلاف بسیاری از نانومواد دوبعدی رفتار فلزی دارد، نقطه قوتی برجسته برای توسعه فناوری‌های نوین مبتنی بر این ماده محسوب می‌شود [۳۱].

در این پژوهش، مجموعه‌ای از نانوساختارهای هیبریدی موسوم به نانوغنچه‌های کربنی از طریق اتصال خوشه فولرن C_{20} به سطح بوروفن B_{36} طراحی شده‌اند. هدف از این طراحی، بررسی ویژگی‌های ترکیبی این دو آلوتروپ کربنی به منظور بهبود عملکرد در مقیاس نانو است. برای تحلیل دقیق خواص این ساختارها، محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام شده است. خواص متعددی از جمله پاسخ نوری غیرخطی، شاخص‌های واکنش‌پذیری شیمیایی، رفتار انتقال بار و سایر ویژگی‌های الکترونی و ساختاری مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. نتایج به دست آمده می‌توانند در درک بهتر از تعاملات بین فولرن‌ها و بوروفن و همچنین توسعه کاربردهای آینده این ساختارهای هیبریدی در حوزه‌هایی چون نانوالکترونیک، اپتوالکترونیک و سامانه‌های انتقال دارو مؤثر واقع شوند.

۲- محاسبات

در این پژوهش، تمامی ساختارها و محاسبات با استفاده از نرم‌افزار Gaussian نسخه ۰۹ انجام شد [۳۲]. بهینه‌سازی هندسه مولکول‌ها با بهره‌گیری از روش تابعی ترکیبی B3LYP در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) و مجموعه پایه 311-6 G(d,p) صورت گرفت. پس از بهینه‌سازی ساختارها، چگالی حالات الکترونی (DOS) که معرف خواص الکتریکی مولکول‌ها است، با استفاده از نرم‌افزار GaussSum استخراج گردید. همچنین، انرژی شکاف (E_g) با توجه به رابطه (۱) محاسبه شد [۳۳].

$$E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad (1)$$

که در آن، انرژی بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال

بین این دو جزء در نظر گرفته شد. سپس با انجام بهینه‌سازی هندسی اولیه در سطح نظری B3LYP/6-311G(d,p) ساختارهای پایدارتر از نظر انرژی و دارای تقارن هندسی معقول انتخاب شدند. در نهایت، پنج پیکربندی مشخص با برچسب A تا E که کمترین انرژی و بیشترین ثبات نسبی را در بین ساختارهای بررسی شده نشان دادند، برای تحلیل‌های بیشتر مورد استفاده قرار گرفتند. انتخاب این ساختارها همچنین با در نظر گرفتن شهود شیمیایی در مورد برهم‌کنش‌های بین خوشه‌ای و توزیع یکنواخت اجزا انجام شد. در پیکربندی اول (پیکربندی A)، فولرن C₂₀ و بروفن B₃₆ از طریق دو اتم کربن و بور در سطح داخلی به یکدیگر متصل شدند. در حالت دوم (پیکربندی B)، فولرن C₂₀ با استفاده از پنج اتم کربن از سطح خارجی بروفن B₃₆ به این نانو ساختار دوبعدی متصل گردید. برای ایجاد پیکربندی C، فولرن C₂₀ به کمک سه اتم کربن از سطح خارجی به بروفن B₃₆ متصل شد. نانوغنچه چهارم (پیکربندی D)، از طریق اتصال فولرن C₂₀ به کناره‌های بروفن B₃₆ با دو پیوند شکل گرفت. در نهایت، در ساختار پنجم (پیکربندی E)، اتصال فولرن C₂₀ و بروفن B₃₆ از سطح خارجی بروفن با دو پیوند انجام شد. شکل ۱ ساختار بهینه شده هر یک از این مولکول‌های طراحی شده را نمایش می‌دهد.

به منظور ارزیابی پایداری دینامیکی ساختارهای طراحی شده، آنالیز فرکانسی بر روی هندسه‌های بهینه شده انجام گرفت. مقادیر اولین فرکانس‌های ارتعاشی محاسبه شده برای تمامی ساختارهای طراحی شده در جدول ۱ ارائه گردیده است. نتایج این تحلیل، که بر پایه محاسبات طیف ارتعاشی مادون قرمز (IR) استوار است، نشان داد

که تمامی ساختارهای مورد بررسی فاقد فرکانس‌های موهومی (مقدار منفی) هستند. عدم وجود فرکانس‌های موهومی بیانگر آن است که ساختارها در یک نقطه مینیمم واقعی از سطح انرژی پتانسیل قرار دارند و به درستی بهینه‌سازی شده‌اند. این امر تأییدی بر پایداری دینامیکی و فیزیکی

قطبش‌پذیری و ابرقطبی‌پذیری هستند. قطبش‌پذیری (α) و ابرقطبی‌پذیری اول (β^0) به صورت معادلات (۹) و (۱۰) بیان می‌شوند.

$$\alpha = 1/3(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}) \quad (9)$$

$$\beta^0 = (\beta_x^2 + \beta_y^2 + \beta_z^2)^{1/2} \quad (10)$$

که در آن مطابق با معادله (11):

$$\beta_i = 3/5(\beta_{iii} + \beta_{jjj} + \beta_{kkk}) \quad i, j, k = x, y, z \quad (11)$$

β^0 اولین هاپرپولاریزاسیون می‌باشد که یک تانسور رتبه سوم است و به عنوان ضریب پاسخ نوری غیرخطی (NLO) شناخته می‌شود. مقادیر قطبش‌پذیری (α) و ابرقطبی‌پذیری اول (β^0)، که نماینده خواص نوری خطی و غیرخطی نانولوله‌ها هستند، با استفاده از دو مجموعه پایه 6-311G(d,p) و CAM-B3LYP محاسبه شدند [۳۷].

انرژی مولکول‌های طراحی شده در سطح نظری CAM-B3LYP/6-311++G(2df,2pd) محاسبه گردید. بر اساس این مقادیر، انرژی پیوستگی برای تمامی ساختارها تعیین شد. انرژی پیوستگی نشان‌دهنده میزان انرژی لازم برای تجزیه یک ترکیب به اتم‌های خنثی و آزاد آن در حالت پایه و با پیکربندی الکترونیکی مشابه است. این پارامتر مطابق با رابطه (۱۲) محاسبه می‌شود.

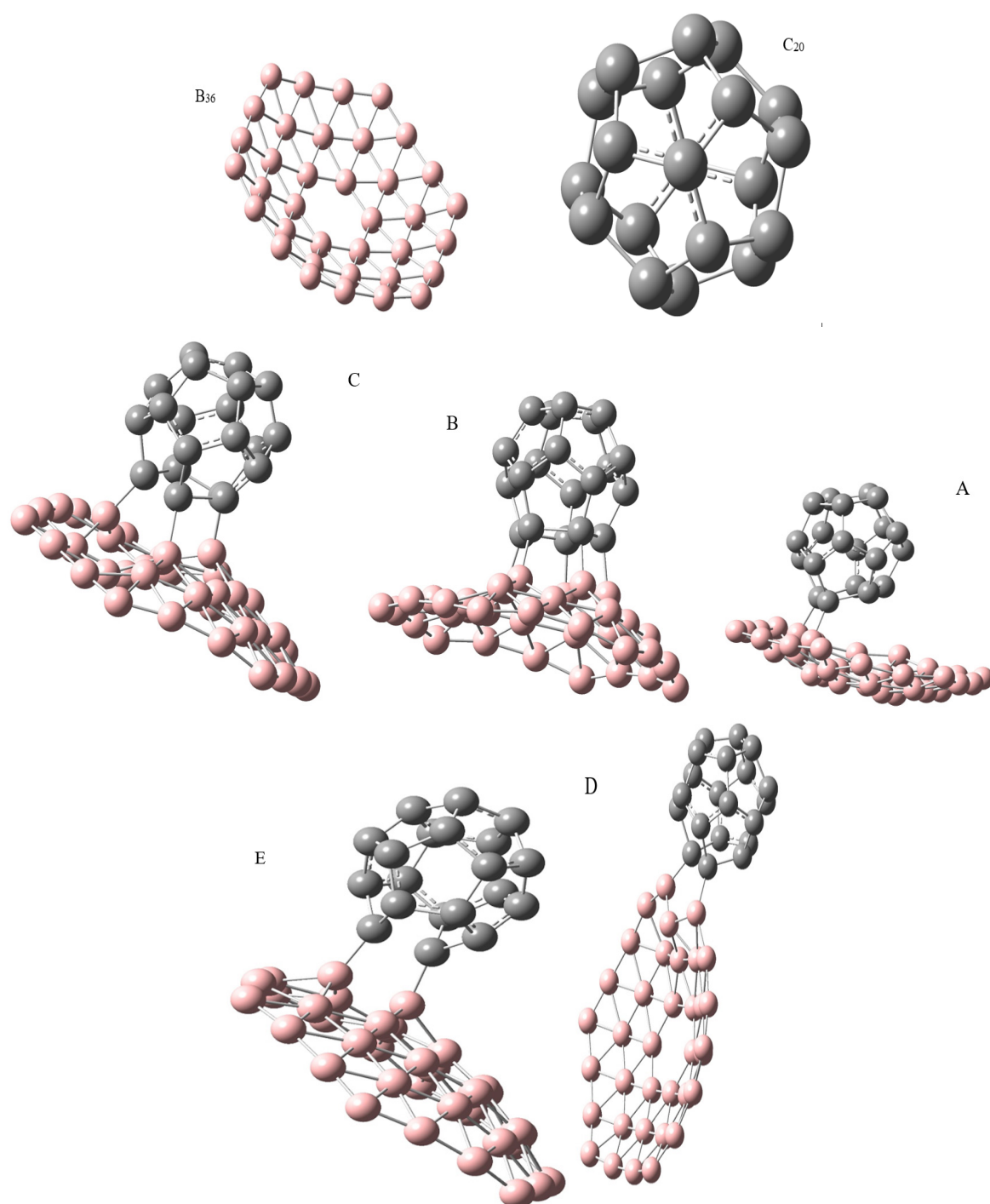
$$E_{Coh} = (\sum nE_i - E_{tot})/n \quad (12)$$

که در آن E_i ، E_{tot} و n به ترتیب انرژی کل تمام مولکول‌های طراحی شده، انرژی اتمی کربن و تعداد کل اتم‌های کربن هستند [۳۸].

۳- بحث و نتایج

۳-۱- مطالعات ساختاری

در این مطالعه، جهت طراحی نانوغنچه‌های مشتق شده از خوشه‌های B₃₆ و C₂₀، ابتدا مجموعه‌ای از پیکربندی‌های ممکن بر اساس اتصال‌های متفاوت



شکل ۱: ساختار بهینه شده برای مولکول‌های مرجع و نانوغنچه‌های طراحی شده

طراحی شده از لحاظ پایداری دینامیکی قابل اعتماد بوده و می‌توان آن‌ها را برای مطالعات بیشتر در حوزه‌های الکترونی، نوری یا واکنش‌پذیری شیمیایی مورد استفاده قرار داد.

×

ساختارهای مطالعه‌شده محسوب می‌شود. به‌طور کلی، مثبت بودن تمامی مقادیر فرکانس ارتعاشی و عدم مشاهده فرکانس‌های موهومی، تأییدی بر پایداری ساختارها و صحت هندسه‌های بهینه‌شده است. این یافته‌ها بیانگر آن هستند که ساختارهای

جدول ۱: مقادیر اولین فرکانس‌های محاسبه‌شده برای ساختارهای مرجع و نانوغنچه‌های طراحی‌شده

فرکانس (cm^{-1})	پیکربندی
۶۲/۹۳۵۲	B ₃₆
۱۲۴/۷۳۸۵	C ₂₀
۳۶/۵۵۷	A
۶۰/۸۹۶۲	B
۵۱/۴۵۳۸	C
۱۷/۳۸۹	D
۲۹/۹۹۹۳	E

جدول ۲: مقادیر محاسبه‌شده انرژی‌های نسبی و جمعیت نسبی برای ساختارهای مرجع و نانوغنچه‌های طراحی‌شده

پیکربندی	انرژی نسبی (کیلوژول بر مول)	جمعیت نسبی	درصد جمعیت نسبی
A	۲۵۳۳۶/۱۱۵۷	$3/62.96 \times 10^{-5}$	0.03620823
B	۳۶۵۳۰/۹۲۹۰۵	$3/94894 \times 10^{-7}$	$3/948179 \times 10^{-5}$
C	۱۴۶۶۲۹/۲۰۵۱	$1/98296 \times 10^{-24}$	$1/98298 \times 10^{-24}$
D	۷۱۱۷۸/۷۹۳۳۵	$3/3346 \times 10^{-13}$	$3/33448 \times 10^{-11}$
E	۰/۰۰	۱/۰۰	۹۹/۹۹۶۳۴

جدول ۳: مقادیر محاسبه‌شده انرژی‌های پیوستگی برای ساختارهای مرجع و نانوغنچه‌های طراحی‌شده

پیکربندی	انرژی پیوستگی (کیلوکالری بر مول)
B ₃₆	۱۱۶/۶۸۵۳
C ₂₀	۱۸۳/۴۶۷۶
A	۱۴۱/۶۰۶۱
B	۱۴۱/۵۵۸۵
C	۱۴۱/۰۹۰۴
D	۱۴۱/۴۱۱۲
E	۱۴۱/۷۱۳۹

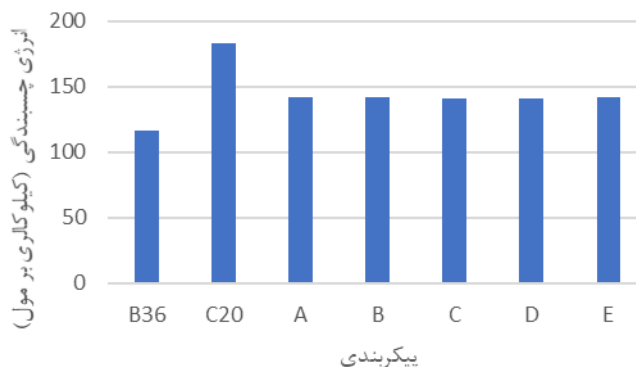
به منظور ارزیابی پایداری ترمودینامیکی و امکان‌پذیری تشکیل نانوغنچه‌های طراحی‌شده، محاسبات انرژی پیوستگی در سطح نظری CAM-B3LYP/6-311++G(2df,2pd) انجام گرفت. مقادیر انرژی پیوستگی محاسبه‌شده برای ساختارهای بهینه‌شده مولکولی در جدول‌های ۲ و ۳ ارائه شده است. تحلیل نتایج نشان می‌دهد که تمامی ساختارهای پیشنهادی از پایداری ترمودینامیکی مناسبی برخوردار بوده و تشکیل آن‌ها به طور نظری ممکن است. شکل ۲ نیز مقادیر انرژی پیوستگی محاسبه‌شده را به صورت گرافیکی نمایش می‌دهد. به طور ویژه،

انرژی پیوستگی بالاتر ساختار C₂₀ نسبت به B₃₆ و سایر مولکول‌های طراحی‌شده، احتمالاً ناشی از تقارن بالای این ساختار و ویژگی‌های آروماتیک برجسته آن است که به طور قابل توجهی پایداری ساختاری را افزایش می‌دهد.

مقادیر انرژی پیوستگی محاسبه‌شده برای پیکربندی‌های مختلف نانوغنچه‌ها در جدول ۳ ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد که ساختار C₂₀ با انرژی پیوستگی ۱۸۳/۴۷ کیلوکالری بر مول، بیشترین پایداری ترمودینامیکی را در میان نمونه‌های مورد بررسی داراست. این مقدار انرژی پیوستگی بالا

جدول ۴: مقادیر محاسبه شده انرژی اتصال C_{20} به B_{36} برای نانوغنچه‌های طراحی شده

پیکربندی	انرژی اتصال C_{20} به B_{36} (کیلوکالری بر مول)
A	-۵۳/۵۸
B	-۵۰/۰۷
C	-۲۷/۲۸
D	-۴۵/۱۵
E	-۵۹/۹۴



شکل ۲: نمودارهای انرژی‌های پیوستگی برای ساختارهای مرجع و نانوغنچه‌های طراحی شده

۳-۲- خواص الکتریکی

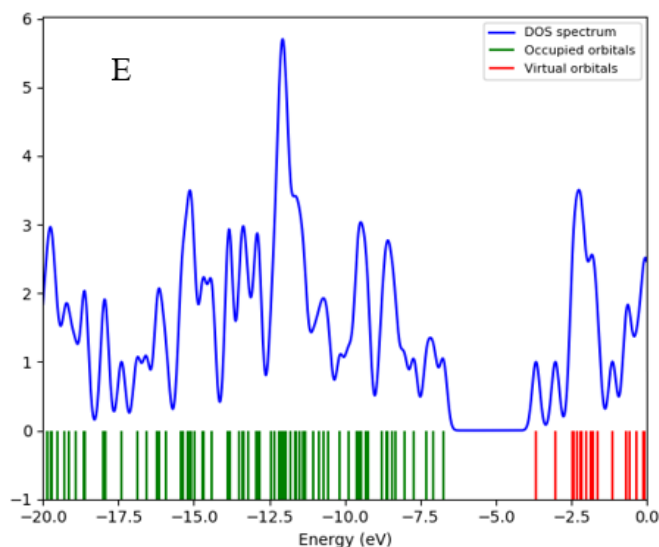
با استفاده از نتایج حاصل از بهینه‌سازی ساختار مولکول‌ها و بهره‌گیری از نرم‌افزار GaussSum، طیف‌های چگالی حالت الکترونی (DOS) برای بررسی ویژگی‌های الکتریکی ساختارهای طراحی شده محاسبه گردید که در شکل ۳ ارائه شده‌اند. بر اساس این طیف‌ها، مقادیر مربوط به بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO)، پایین‌ترین اوربیتال مولکولی غیر اشغال شده (LUMO) و گاف انرژی (Eg) استخراج شده‌اند که در جدول ۵ گزارش شده است. نمودارهای DOS بیانگر آن هستند که در نواحی انرژی با تراکم بالای حالت‌های الکترونی، ارتفاع پیکها افزایش یافته و در مقابل، در بازه‌هایی که چگالی حالت‌های الکترونی کمتر است یا حالت الکترونی وجود ندارد، ارتفاع پیکها کاهش یافته یا به صفر می‌رسد. ناحیه بین اوربیتال‌های HOMO و LUMO که فاقد حالت الکترونی است، به عنوان ناحیه ممنوعه شناخته می‌شود و فاصله انرژی بین این دو اوربیتال، یعنی گاف انرژی (Eg)، به عنوان شاخصی از رسانایی احتمالی نانوخوشه محسوب می‌شود. به منظور تحلیل توزیع بار الکتریکی و بررسی انتقال بار بین اجزاء آنالیز (NBO) انجام گرفت. بر این اساس، مقدار بار الکتریکی انتقال یافته از فولرن به بروفن با نماد Qt محاسبه شد. نتایج مربوط به این تحلیل در جدول ۵ ارائه شده‌اند.

بیانگر وجود پیوندهای قوی‌تر و ساختار منسجم‌تر در این پیکربندی می‌باشد. پیکربندی‌های A تا E با انرژی پیوستگی‌های نزدیک به هم و در حدود ۱۴۱ کیلوکالری بر مول قرار گرفته‌اند که نشان‌دهنده پایداری قابل قبول این ساختارها است. تفاوت اندک بین این مقادیر می‌تواند ناشی از تفاوت‌های جزئی در هندسه و توزیع اتمی در این پیکربندی‌ها باشد. از سوی دیگر، پیکربندی B_{36} با انرژی پیوستگی ۱۱۶/۶۹ کیلوکالری بر مول پایین‌ترین پایداری را در میان نمونه‌ها نشان می‌دهد که احتمالاً به دلیل ضعف نسبی پیوندها و ساختار نسبتاً کمتر منسجم آن می‌باشد. به طور کلی، این نتایج بیانگر این است که پیکربندی C_{20} از نظر پایداری ترمودینامیکی برتری قابل توجهی نسبت به سایر ساختارهای مورد مطالعه دارد و سایر پیکربندی‌ها در بازه‌ای از پایداری متوسط قرار دارند.

در ادامه انرژی اتصال دو نانوذره فولرن B_{36} و C_{20} از معادله (۱۳) محاسبه شد که نتایج آن در جدول (۴) مشاهده می‌شود.

$$E_b = E_{\text{complex}} - (E_{B_{36}} - E_{C_{20}}) \quad (13)$$

در جدول ۴ به خوبی نشان داده شده است که انرژی اتصال C_{20} به B_{36} ، برای همه نانوغنچه‌های طراحی شده منفی می‌باشد که خود می‌تواند دلیلی بر پایداری نانو غنچه‌ها باشد در نتیجه با توجه به نتایج محاسبه فرکانس ارتعاشی، انرژی پیوستگی و انرژی اتصال شواهد مناسبی جهت پایداری نانو غنچه‌ها به دست آمد.



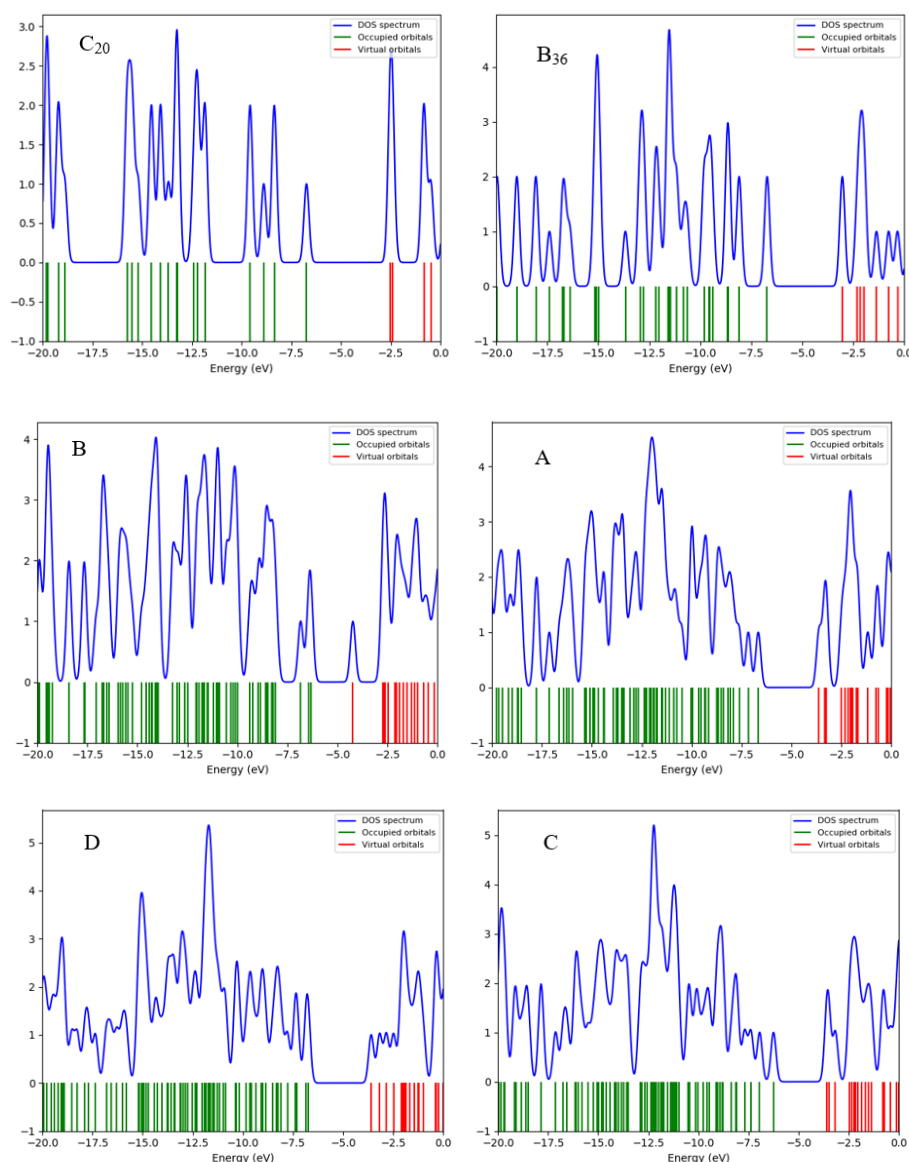
شکل ۳: نمودارهای چگالی حالت‌ها (DOS) برای مولکول‌های طراحی شده.

جدول ۵: مقادیر EHOMO، ELUMO و Eg محاسبه شده برای مولکول‌های مرجع و نانوغچه‌ها

پیکربندی	HOMO(eV)	LUMO(eV)	Eg(eV)	Qt (a.u.)
B ₃₆	-۶/۷۲	-۳/۰۳	۳/۶۹	-
C ₂₀	-۶/۷۴	-۲/۵۱	۴/۲۳	-
A	-۶/۶۶	-۳/۶۲	۳/۰۴	-۰/۶۵۸۵۳
B	-۶/۳۱	-۴/۲۲	۲/۰۹	-۰/۸۲۴۶۹
C	-۶/۲۵	-۳/۶۰	۲/۶۵	-۰/۶۴۰۴۰
D	-۶/۳۷	-۳/۵۹	۳/۱۴	-۰/۶۰۱۷۳
E	-۶/۷۴	-۳/۶۷	۳/۰۷	-۰/۴۹۵۰۶

مقادیر منفی Qt نشان‌دهنده انتقال الکترون از بخش B₃₆ (بور) به C₂₀ (کربن) هستند و بزرگی مقدار Qt بیانگر شدت این انتقال بار است. بیشترین مقدار گاف انرژی (Eg) مربوط به ساختار C₂₀ است که نشان‌دهنده پایداری الکترونیکی بالای آن می‌باشد. ساختارهای مرجع B₃₆ و C₂₀ به ترتیب دارای گاف‌های انرژی ۳/۶۹ eV و ۴/۲۳ eV هستند که رفتار نیمه‌رسانا و پایداری نسبی آن‌ها در حالت منفرد را نشان می‌دهد. در ترکیب‌های A تا

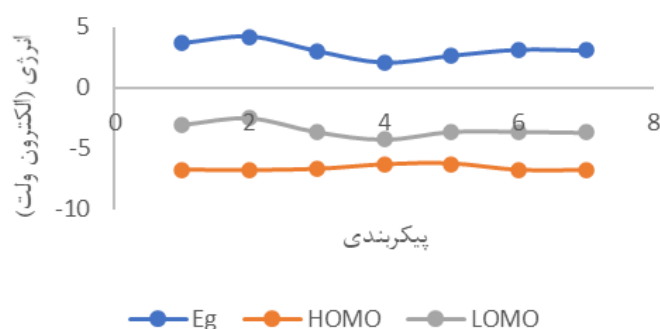
جدول ۵ مقادیر انرژی اوربیتال‌های مرزی HOMO و LUMO، گاف انرژی (Eg) و بار انتقال یافته (Qt) را برای ساختارهای مرجع B₃₆ و C₂₀ و پیکربندی‌های ترکیبی A تا E نشان می‌دهد. این داده‌ها برای بررسی پایداری الکترونیکی و رفتار انتقال بار بین اجزای تشکیل‌دهنده نانوخوشه‌ها اهمیت ویژه‌ای دارند. مقدار Qt بر حسب واحد سیستم اتمی (a.u.) گزارش شده است که از نظر فیزیکی هر ۱ a.u. تقریباً معادل بار یک الکترون (1e) است. بنابراین



جدول ۵: مقادیر E_{HOMO} ، E_{LUMO} و E_g محاسبه شده برای مولکول‌های مرجع و نانوغنچه‌ها

(۲/۰۴) و کربن (۲/۵۵) تفسیر کرد؛ به‌طور طبیعی، الکترون‌ها تمایل دارند از نواحی با الکترونگاتیوی کمتر (بور) به نواحی با الکترونگاتیوی بالاتر (کربن) منتقل شوند. این گرایش طبیعی در تمام پیکربندی‌ها دیده می‌شود، اما شدت آن به نحوه اتصال و هندسه ساختار نیز بستگی دارد. به‌عنوان مثال، ساختارهایی که تماس سطحی بیشتر و توزیع مناسب‌تری از اوربیتال‌ها دارند (مانند پیکربندی B)، انتقال بار بیشتری را ممکن می‌سازند. در مقابل، ساختارهایی با

E_g ، کاهش قابل توجهی در E_g و تغییرات مشخصی در Q_t مشاهده می‌شود. پیکربندی B دارای کمترین گاف انرژی (۲/۰۹ eV) و بیشترین مقدار بار انتقال یافته (e) است که نشان‌دهنده انتقال بار قوی و افزایش رسانایی الکترونی است. این ویژگی می‌تواند ناشی از تماس مؤثر بین خوشه‌ها، پیوندهای میان خوشه‌ای قوی‌تر و کاهش گاف انرژی ناشی از برهم‌کنش بین اوربیتال‌ها باشد. تفاوت در مقادیر Q_t را می‌توان با در نظر گرفتن الکترونگاتیوی نسبی بور



شکل ۴: نمودارهای HOMO, LUMO, Eg برای نانوغنچه‌های طراحی شده.

تقارن بالاتر یا تماس محدودتر بین خوشه‌ها (مانند پیکربندی E)، انتقال بار کمتری را نشان می‌دهند. پیکربندی A با گاف انرژی 3.04 eV و -0.65853 eV $Q_t =$ رفتاری نزدیک به بروفن دارد، اما مقدار منفی Q_t و کاهش در سطوح HOMO و LUMO نشان از جذب الکترون و برهم‌کنش متوسط بین خوشه‌ها دارد. پیکربندی‌های C و D به ترتیب با Eg برابر 2.65 eV و 3.14 eV و مقادیر Q_t معادل -0.64040 e و -0.60173 e ، رفتار میانه‌ای از نظر پایداری و رسانایی الکترونیکی نشان می‌دهند. ساختار E نیز با Eg برابر 3.07 eV و کمترین Q_t (-0.49506 e) از نظر انتقال بار ضعیف‌ترین ساختار طراحی شده محسوب می‌شود. این می‌تواند ناشی از تقارن بیشتر، زاویه اتصال نامناسب یا ممانعت فضایی بیشتر باشد که انتقال بار بین خوشه‌ها را محدود می‌کند. در مجموع، ترکیب دو پارامتر Eg و Q_t نشان می‌دهد که پیکربندی B با کمترین گاف انرژی و بیشترین بار منتقل شده می‌تواند به عنوان فعال‌ترین ساختار الکترونی در بین نمونه‌های طراحی شده محسوب شود. مقادیر انرژی HOMO، LUMO، Eg برای مولکول‌های مرجع و نانوغنچه‌های ترکیبی در شکل ۴ نیز قابل مشاهده‌اند.

در شکل ۴، بهبود رفتار الکتریکی نانوغنچه‌های طراحی شده در مقایسه با B_{36} و C_{20} قابل مشاهده است. بنابراین، E_g محاسبه شده برای نانوغنچه‌های طراحی شده کمتر از B_{36} و C_{20} است و ترکیبات طراحی شده در مقایسه با نانوساختارهای مرجع، خواص الکتریکی بهتری دارند. نمودار ارائه شده

تغییرات انرژی‌های HOMO، LUMO و گاف انرژی (Eg) را برای مجموعه‌ای از ساختارهای مورد مطالعه نشان می‌دهد. بر اساس این نمودار، مقدار HOMO (نمودار نارنجی) در تمامی ساختارها در بازه‌ای تقریباً ثابت بین 2.0 eV تا 6.80 eV قرار دارد. کمترین مقدار HOMO در پیکربندی E مشاهده می‌شود که نشان‌دهنده پایدارتر بودن الکترونیکی این ساختار در لبه بالایی نوار ظرفیت است. مقدار LUMO (نمودار خاکستری) دارای نوسانات بیشتری است، به‌ویژه بین پیکربندی‌های C_{20} تا پیکربندی C که کاهش محسوس انرژی LUMO مشاهده می‌شود. این تغییرات می‌تواند بیانگر افزایش پتانسیل پذیرش الکترون در برخی ساختارها باشد. مقدار گاف انرژی (نمودار آبی) که اختلاف انرژی بین HOMO و LUMO را نمایش می‌دهد، در پیکربندی‌های B و C به حداقل مقدار خود حدود 2 eV می‌رسد و در ساختارهای B_{36} و C_{20} بیشترین مقدار بالای 4 eV را دارد. کاهش Eg در پیکربندی‌های میانی نشان‌دهنده افزایش رسانایی احتمالی آن ساختارها است که می‌تواند ناشی از برهم‌کنش‌های بین اجزای نانوخوشه و کاهش فاصله بین سطوح انرژی مرزی باشد. از سوی دیگر، ساختارهایی با Eg بالا (مثل ساختارهای B_{36} و C_{20}) پایداری الکترونیکی بیشتری داشته اما خاصیت نیمه‌رسانایی ضعیف‌تری دارند. با داشتن مقادیر انرژی‌های HOMO و LUMO، می‌توان مقادیر سختی شیمیایی (η)، پتانسیل شیمیایی (μ)، الکتروفیلیسیته (ω)، پتانسیل یونیزاسیون (I)، الکترون‌خواهی (A) و الکترون‌گاتیوی (χ) را محاسبه

جدول ۶: مقادیر سختی شیمیایی (η)، پتانسیل شیمیایی (μ)، الکتروفیلیسیته (ω)، پتانسیل یونیزاسیون (I)، الکترون خواهی (A) و الکترون گاتیویته (χ) مربوط به ساختارهای بکر و نانوغنچه‌های طراحی شده

پیکربندی	η (eV)	μ (eV)	ω (eV)	I (eV)	A (eV)	χ (eV)
B_{36}	۱/۸۴۵	-۴/۸۷۵	۶/۰۰۱۴۲۰	۶/۷۲	۳/۰۳	۴/۸۷۵
C_{20}	۲/۱۱۵	-۴/۶۲۵	۵/۰۵۶۸۸۵	۶/۷۴	۲/۵۱	۴/۶۲۵
A	۱/۲۵۰	-۵/۱۴۰	۱۰/۵۶۷۸۴	۶/۶۶	۳/۶۲	۵/۱۴۰
B	۱/۰۴۵	-۵/۲۶۵	۱۳/۲۶۳۲۶	۶/۳۱	۴/۲۲	۵/۲۶۵
C	۱/۳۲۵	-۴/۹۲۵	۹/۱۵۳۰۶	۶/۲۵	۳/۶۰	۴/۹۲۵
D	۱/۵۷۰	-۵/۱۶۰	۸/۴۷۹۴۹	۶/۳۷	۳/۵۹	۵/۱۶۰
E	۱/۵۳۵	-۵/۲۰۵	۸/۸۲۴۷۶	۶/۷۴	۳/۶۷	۵/۲۰۵

کرد که در جدول ۶ نشان داده شده‌اند.

جدول ۶ پارامترهای مفهومی نظریه تابع چگالی (DFT) را برای ارزیابی واکنش‌پذیری شیمیایی و ویژگی‌های الکترونی ساختارهای مورد بررسی ارائه می‌دهد. مطابق با جدول، سختی شیمیایی (η) که نشان دهنده مقاومت سیستم در برابر تغییر چگالی بار الکترونی است، برای ساختار C_{20} بیشترین سختی شیمیایی (۲/۱۱۵ eV) را دارد، بنابراین از نظر الکترونی پایدارتر است. پیکربندی B با کمترین مقدار سختی (۱/۰۴۵ eV) نشان‌دهنده بیشترین حساسیت الکترونی و پتانسیل واکنش‌پذیری بالاتر است. از طرف دیگر، پتانسیل شیمیایی (μ) مقدار تمایل سیستم به دریافت یا از دست دادن الکترون را بیان می‌کند. مقدار منفی بیشتر نشان‌دهنده تمایل بیشتر به جذب الکترون است. پیکربندی‌های B و E بیشترین تمایل به جذب الکترون را دارند (۵/۲ eV $\approx \mu$)، در حالی که ساختار C_{20} تمایل کمتری دارد. الکتروفیلی (ω)، شاخصی از تمایل مولکول به جذب الکترون و پایداری آن پس از واکنش است. پیکربندی B با مقدار بسیار بالای الکتروفیلی (۱۳/۲۶ eV) نشان‌دهنده یک پذیرنده قوی الکترون و واکنش‌پذیرتر از سایر ساختارهاست. ساختارهای مرجع B_{36} و C_{20} نسبتاً الکتروفیل‌های ضعیف‌تری هستند. پتانسیل یونش (I) و الکترون خواهی (A)، این دو پارامتر به ترتیب نشان‌دهنده انرژی مورد نیاز برای از دست دادن یا جذب یک الکترون هستند. C_{20} کمترین الکترون خواهی (eV)

(۱۳/۲۶) را دارد، در حالی که B و E بالاترین الکترون خواهی را نشان می‌دهند، یعنی تمایل بالاتر به گرفتن الکترون را دارند. الکترون گاتیوی (χ)، برابر با مقدار میانگین I و A است. پیکربندی B و E بیشترین الکترون گاتیوی (۵/۲۶۵ eV و ۵/۲۰۵ eV) را دارند که نشان‌دهنده تمایل بیشتر به جذب الکترون است. C_{20} کمترین الکترون گاتیوی را دارد (۴/۶۲۵ eV)، که نشان‌دهنده پایداری نسبی بالاتر و واکنش‌پذیری کمتر است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که پیکربندی B از نظر واکنش‌پذیری شیمیایی، بیشترین پتانسیل را برای پذیرش الکترون، الکتروفیل‌ترین با μ و χ بالا دارد. C_{20} ساختاری پایدار با سختی شیمیایی بالا، الکتروفیلی پایین و تمایل کمتر به شرکت در واکنش‌های الکترونی است. سایر پیکربندی‌ها در بازه‌ای بین این دو رفتار قرار می‌گیرند و می‌توانند بسته به شرایط مورد استفاده، خواص مناسبی از خود نشان دهند.

از مقادیر گزارش شده در جدول ۶ به خوبی می‌توان دریافت که مولکول‌های طراحی شده سختی کمتری نسبت به B_{36} و C_{20} دارند که نشان‌دهنده افزایش واکنش‌پذیری نانوغنچه‌های طراحی شده در مقایسه با نانوخوشه‌های مرجع است. همچنین، مقادیر الکتروفیلیسیته محاسبه شده برای نانوغنچه‌های طراحی شده بیشتر از مقادیر محاسبه شده برای C_{20} و B_{36} است. انرژی یونیزاسیون و مقادیر الکترون خواهی محاسبه شده برای نانوغنچه‌های طراحی شده،

نشان دهنده واکنش پذیری بالاتر آنها در مقایسه با نانوخوشه های مرجع است.

به منظور بررسی ویژگی های الکترونی و فضایی پیوندها در ساختار نانوغنچه های متشکل از بور و کربن، هیبریداسیون اتم های شرکت کننده در پیوندهای مختلف مورد ارزیابی قرار گرفت. یکی از نکات قابل توجه در این تحلیل، تفاوت خصلت های s و p در پیوندهایی است که بسته به موقعیت فضایی شان نسبت به پیوندهای کلیدی کربن-بور (C-B) در ساختار، به دو دسته ی نزدیک و دور تقسیم شده اند. نتایج حاصل در جدول ۷ نشان می دهد که پیوندهای نزدیک تر به پیوندهای C-B، غالباً دارای خصلت s بیشتر هستند. این پیوندها با مقادیر هیبریداسیون پایین تر نظیر sp^1 تا sp^2 مشخص می شوند که نشان دهنده ی مشارکت بیشتر اوربیتال های s با چگالی الکترونی بالا و تقارن کروی در تشکیل این پیوندهای کوتاه و محکم است. چنین پیوندهایی نقشی کلیدی در پایداری موضعی نواحی مرکزی ساختار و تقویت ناحیه ی اطراف پیوندهای C-B ایفا می کنند. در مقابل، پیوندهایی که از لحاظ فضایی در نواحی دورتری نسبت به پیوندهای C-B قرار دارند، معمولاً هیبریداسیون هایی با خصلت p بالا نظیر sp^4 تا sp^5 دارند. اوربیتال های p با توجه به شکل کشیده تر خود، قادرند در فواصل بلندتر نیز برهم پوشانی مؤثر داشته باشند و بنابراین، این پیوندها اغلب در نواحی محیطی تر ساختار حضور دارند و در شکل گیری چارچوب کلی نانوغنچه مشارکت دارند. این الگوی توزیع هیبریداسیون نشان دهنده ی وجود یک تقارن در ساختار نانوغنچه های B-C است؛ به طوری که پیوندهای نزدیک تر به مراکز فعال مانند پیوندهای C-B با خصلت s غنی تر، موجب تقویت پایداری محلی شده و در مقابل، پیوندهای دورتر با خصلت p غالب، انعطاف پذیری ساختار را در مقیاس بزرگ تر ممکن می سازند.

پیوندهای میان بور و کربن (B-C) در ساختار نانوغنچه های $B_{36}-C_{20}$ از اهمیت ویژه ای برخوردارند، چرا که نقش اتصال دهنده ی میان

عناصر با الکترون خواهی و ظرفیت متفاوت را ایفا می کنند و در تعیین خواص الکترونی، هندسی و پایداری ساختار، سهم قابل توجهی دارند. با توجه به بررسی های انجام شده، این پیوندها اغلب دارای هیبریداسیون هایی با مقدار خصلت p میانه تا بالا هستند نظیر $sp^{2.14}$ تا $sp^{5.09}$ برای B و $sp^{2.13}$ تا $sp^{3.54}$ برای C که نشان دهنده ی شرکت مؤثر اوربیتال های p در برهم پوشانی پیوندی است. به دلیل اختلاف الکترون خواهی میان بور (الکترون دوست کمتر) و کربن (الکترون دوست تر)، پیوندهای B-C معمولاً قطبی تر از پیوندهای B-B یا C-C هستند. این قطبیت سبب می شود که بخشی از چگالی بار الکترونی به سمت اتم کربن متمایل شود و در نتیجه، بور در این پیوندها نقش الکترون دهنده نسبی و کربن نقش الکترون گیرنده نسبی را داشته باشد. این جابه جایی بار می تواند منجر به تشکیل مراکز فعال الکترونی در اطراف پیوندهای B-C شود که از نظر واکنش پذیری شیمیایی و خواص الکتریکی، حائز اهمیت است.

برای بررسی رفتار الکترونی و نحوه انتقال بار در نانوخوشه های بررسی شده، اوربیتال های مولکولی مرزی شامل بالاترین اوربیتال اشغال شده (HOMO) و پایین ترین اوربیتال اشغال نشده (LUMO) برای ساختارهای B_{36} ، C_{20} و ترکیب های A تا E محاسبه و در شکل ۵ نمایش داده شده است. این اوربیتال ها نقش کلیدی در تعیین خواص الکترونی، نوری و واکنش پذیری شیمیایی سامانه ها ایفا می کنند. در نانوخوشه ی خالص B_{36} ، هر دو اوربیتال HOMO و LUMO به صورت گسترده بر سطح ساختار بور توزیع یافته اند و ماهیتی π مانند دارند. این پدیده نشان دهنده ی پتانسیل بالای انتقال بار درون ساختار بور است. در مقابل، ساختار C_{20} توزیع متقارن تر و متمرکزتری در نواحی داخلی قفس کربنی از خود نشان می دهد که بیشتر ماهیت σ داشته و بیانگر پایداری الکترونی بالاتر و واکنش پذیری کمتر این خوشه است. در نانوغنچه ها، الگوی توزیع اوربیتال ها بسته به نحوه اتصال دو زیرخوشه تغییر می کند. در

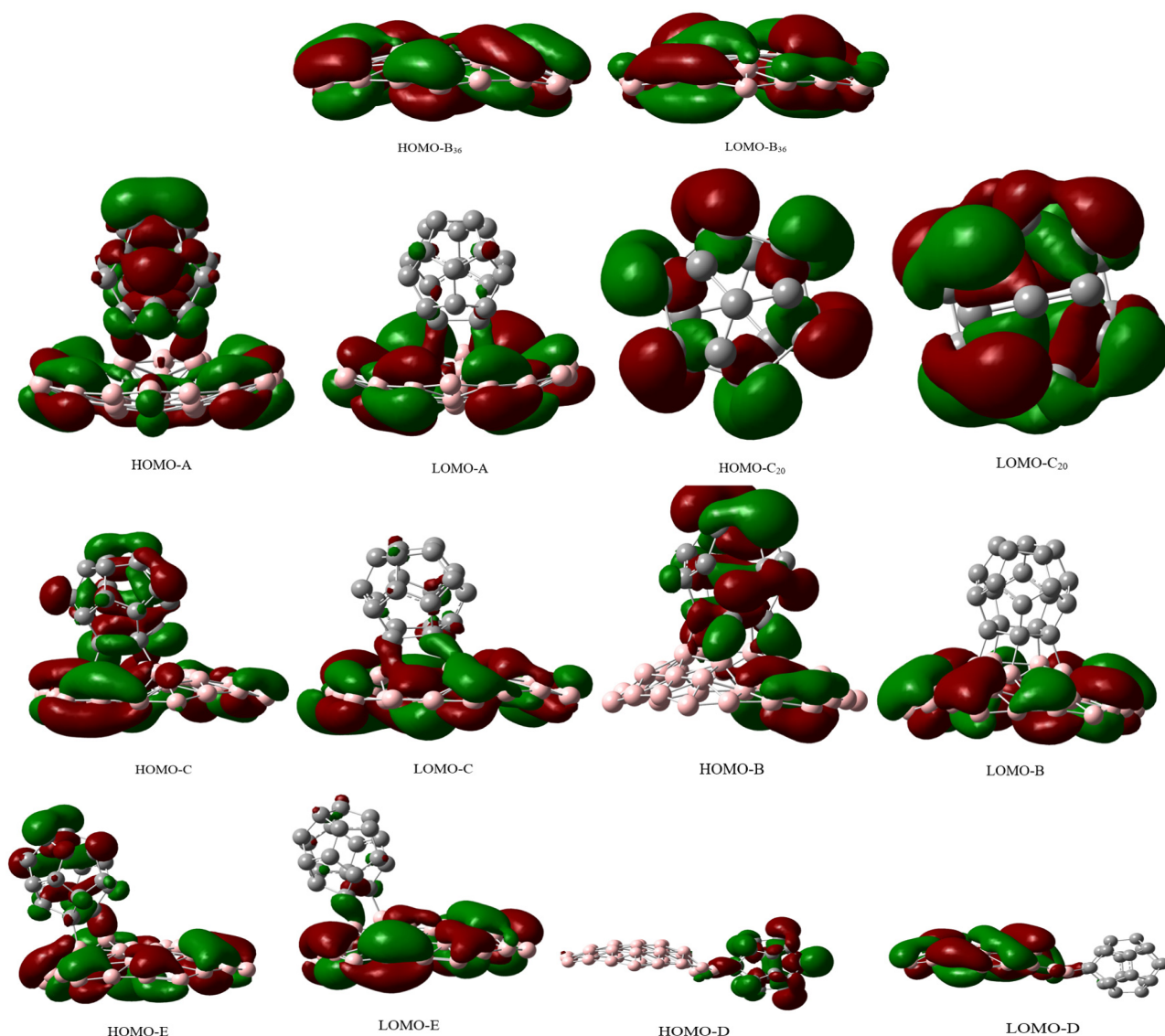
جدول ۷: هیبریداسیون اوربیتال‌های اتم‌های شرکت‌کننده در پیوندها و نوع پیوند مربوط به نانو غنچه‌های بور-کربن

هپیریداسیون	پیوند	پیکربندی
B(8)-sp ^{3.36} B(10)-sp ^{2.12}	B(8)-B(10)	A
B(1)-sp ^{4.23} B(7)-sp ^{4.36}	B(1)-B(7)	
B(13)-sp ^{3.47} C(46)-sp ^{1.72}	B(13)-C(46)	
B(9)-sp ^{5.23} B(11)-sp ^{5.25}	B(9)-B(11)	
B(31)-sp ^{1.83} B(33)-sp ^{1.85}	B(31)-B(33)	B
B(1)-sp ^{5.09} C(41)-sp ^{2.14}	B(1)-C(41)	
B(7)-sp ^{4.52} B(9)-sp ^{5.50}	B(7)-B(9)	
B(24)-sp ^{1.17} B(25)-sp ^{1.79}	B(24)-B(25)	
B(9)-sp ^{3.54} C(40)-sp ^{2.13}	B(9)-C(40)	C
B(3)-sp ^{2.75} B(28)-sp ^{3.76}	B(3)-B(28)	
B(8)-sp ^{4.43} B(10)-sp ^{4.47}	B(8)-B(10)	
B(3)-sp ^{2.18} C(37)-sp ^{1.96}	B(3)-C(37)	
B(1)-sp ^{3.53} B(8)-sp ^{4.90}	B(1)-B(8)	D
B(23)-sp ^{1.89} B(24)-sp ^{1.16}	B(23)-B(24)	
B(8)-sp ^{2.88} C(37)-sp ^{1.80}	B(8)-C(37)	

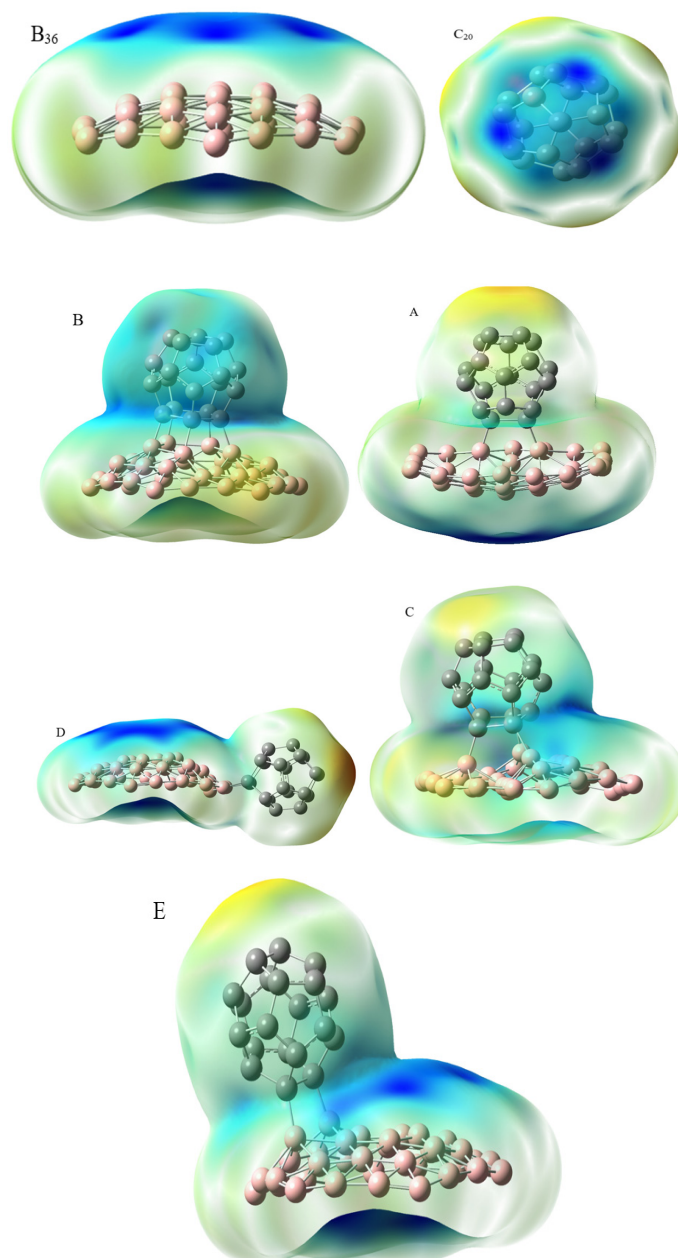
است منجر به کاهش انتقال بار بین خوشه‌ای شود. ساختار E نیز با توزیع پخش‌تر اما نسبتاً نامتقارن اوربیتال‌ها، الگوی متفاوتی از انتقال را نشان می‌دهد که می‌تواند در ویژگی‌های نوری آن تأثیرگذار باشد. در مجموع، نحوه توزیع اوربیتال‌های مرزی می‌تواند مبنایی برای درک تفاوت در گاف انرژی و خواص نوری ساختارهای ترکیبی باشد.

به‌منظور بررسی ویژگی‌های الکترونی و توزیع بار سطحی، نقشه‌ی پتانسیل الکترواستاتیکی برای نانو خوشه‌های خالص B_{36} و C_{20} و همچنین ساختارهای ترکیبی A تا E ترسیم شده و در شکل ۶ ارائه شده

ساختار A، توزیع نسبتاً یکنواخت HOMO و LUMO در هر دو بخش کربنی و بوری مشاهده می‌شود که حاکی از همپوشانی مؤثر اوربیتال‌ها بین خوشه‌هاست. در مقابل، در ساختارهای B و C، HOMO عمدتاً بر بخش B_{36} و LUMO بر بخش C_{20} متمرکز است که نشان‌دهنده انتقال بار ترجیحی از بخش بور به کربن جهت ($B \rightarrow C$) است. این نوع گذار می‌تواند منجر به افزایش قطبش‌پذیری و تأثیر مستقیم بر ویژگی‌های نوری شود. در ساختار D، اوربیتال‌ها بیشتر روی بخش بور متمرکز باقی مانده‌اند که نشان از برهم‌کنش ضعیف‌تر بین دو خوشه دارد و ممکن



شکل ۵: توزیع فضایی اوربیتال‌های مولکولی مرزی (HOMO و LUMO) در نانو خوشه‌های B_{36} ، C_{20} و پیکربندی‌های ترکیبی A تا E



شکل ۶: نقشه پتانسیل الکترواستاتیکی نانوخوشه‌های B_{36} ، C_{20} و نانوغنچه‌های A-E

است. در این نقشه‌ها، رنگ آبی نشان‌دهنده نواحی با پتانسیل الکترواستاتیکی مثبت‌تر (کم‌تراکم از نظر الکترون) و رنگ قرمز یا زرد نشان‌دهنده نواحی با پتانسیل منفی‌تر (غنی از الکترون) است. در ساختار B_{36} ، نواحی آبی‌رنگ اطراف ساختار، به‌ویژه در نواحی بالایی و پایینی، حاکی از کم‌تراکم بودن بار الکترونی در این بخش‌ها بوده که می‌تواند نقش پذیرنده الکترون را ایفا کند. از سوی دیگر، خوشه‌ی C_{20} توزیع متقارن‌تر و نواحی خنثی‌تری (سبز رنگ)

دارد که بیانگر پایداری الکترونی بالاتر و قطبش‌پذیری کمتر آن است. در ساختارهای ترکیبی A تا E، ترکیب دو خوشه باعث ایجاد نواحی ناهمگن از نظر پتانسیل الکترواستاتیکی شده است. در برخی ساختارها مانند B و D، نواحی اتصال حاوی رنگ‌های زرد و سبز تیره است که نشان از چگالی نسبی بالاتر الکترون دارد و می‌تواند عاملی برای افزایش برهم‌کنش‌های الکترواستاتیکی باشد. در مقابل، ساختارهایی مانند A و C دارای توزیع متعادل‌تر و نواحی خنثی‌تری هستند

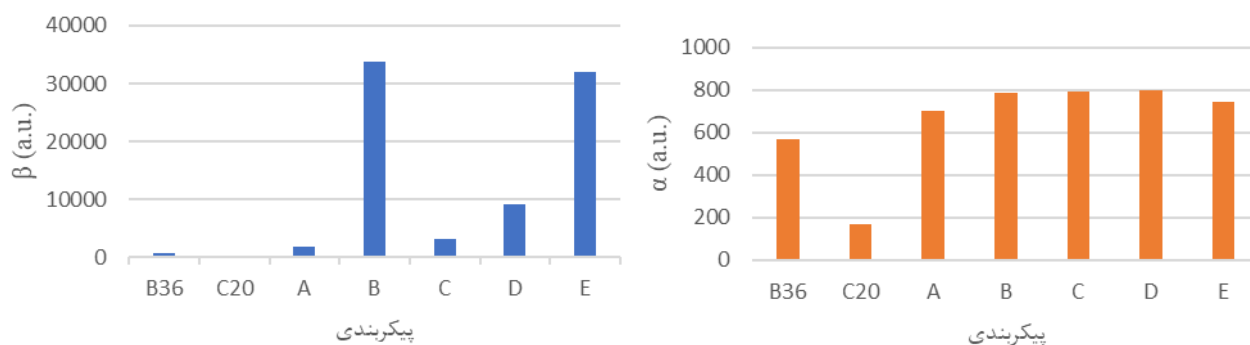
جدول ۸: سهم پراکندگی در انرژی ساختارهای مرجع و نانو غنچه‌های طراحی شده		
پیکربندی	تعداد اتم‌ها	انرژی پراکندگی (کیلوکالری بر مول)
B ₃₆	۳۶	-۲۱/۰۸۰۱
C ₂₀	۲۰	-۱۵/۴۴۴۲
A	۵۶	-۵۹/۱۴۰۹
B	۵۶	-۵۷/۵۴۹۸
C	۵۶	-۵۸/۵۵۰۱
D	۵۶	-۴۸/۴۱۴۴
E	۵۶	-۵۰/۵۴۵۶

۳-۳- خواص نوری غیرخطی

یکی از ویژگی‌های کلیدی که می‌تواند نقش تعیین‌کننده‌ای در بهبود عملکرد ترکیبات نوظهور ایفا کند، خواص نوری غیرخطی (NLO) آن‌هاست. به‌منظور ارزیابی این خواص، محاسبات نظری در سطح CAM-B3LYP/6-311G(d,p) بر روی مولکول‌های طراحی‌شده و مولکول‌های مرجع انجام گرفت. در این راستا، خواص نوری خطی و غیرخطی شامل قطبش‌پذیری و فوق‌قطبش‌پذیری اول، که به‌ترتیب نمایانگر پاسخ نوری خطی و غیرخطی سیستم‌ها هستند، محاسبه و تحلیل شدند. نتایج این محاسبات در جدول ۹ ارائه شده است؛ در این جدول، مقادیر گشتاور دوقطبی، قطبش‌پذیری و فوق‌قطبش‌پذیری اول برای هر یک از مولکول‌های طراحی‌شده و نمونه‌های مرجع با یکدیگر مقایسه شده‌اند. این مقایسه امکان بررسی تأثیر تغییرات ساختاری بر پاسخ نوری سیستم‌ها را فراهم کرده و مبنایی مؤثر برای ارزیابی پتانسیل آن‌ها در کاربردهای نوری غیرخطی ارائه می‌دهد. بررسی داده‌ها نشان می‌دهد که پیکربندی B با بیشترین مقدار فوق‌قطبش‌پذیری ($\beta = 33821/46$ a.u.) و گشتاور دوقطبی نسبتاً بالا ($\mu = 3/08$ D) به‌عنوان مؤثرترین ساختار از نظر خواص نوری غیرخطی شناخته می‌شود. در مقابل، پیکربندی C₂₀ به‌دلیل تقارن کامل، دارای

که احتمالاً به پایداری بالاتر این ترکیبات منجر می‌شود. ساختار E نیز با داشتن نواحی پراکنده‌ی با پتانسیل مثبت و منفی، بیانگر توزیع الکترونی ناهمگون‌تری است که می‌تواند بر خواص نوری و واکنش‌پذیری آن تأثیرگذار باشد.

در این مطالعه، انرژی‌های پراکندگی به‌منظور ارزیابی تأثیر برهم‌کنش‌های واندروالسی و پایداری نسبی سازه‌های مختلف مورد بررسی قرار گرفت. نتایج در جدول ۸ حاصل نشان می‌دهد که بیشترین سهم انرژی پراکندگی مربوط به ساختار A با مقدار $-59/14$ kcal/mol و کمترین آن مربوط به ساختار C₂₀ با مقدار $-15/44$ kcal/mol می‌باشد. منفی بیشتر انرژی پراکندگی بیانگر برهم‌کنش‌های غیریونی قوی‌تر و پایداری واندروالسی بالاتر است. ساختارهای A، B و C دارای انرژی‌های پراکندگی نزدیک به هم و نسبتاً بالا هستند که نشان‌دهنده برهم‌کنش‌های بین‌مولکولی قوی در این سیستم‌هاست. از سوی دیگر، ساختارهای B₃₆ و C₂₀ کمترین مقادیر انرژی پراکندگی را داشته و این موضوع ممکن است به علت سطح تماس کمتر، تراکم الکترونی پایین‌تر یا هندسه بازتر در این ساختارها باشد. در مجموع، انرژی پراکندگی نقش مؤثری در پایداری نسبی ساختارها ایفا کرده و باید در تحلیل‌های ترمودینامیکی و طراحی سیستم‌های نانومقیاس به آن توجه ویژه‌ای داشت.



شکل ۷: تحلیل مقایسه‌ای قطبش‌پذیری و ابرقطبش‌پذیری در ساختارهای منتخب نانوخشه‌های بور-کربن

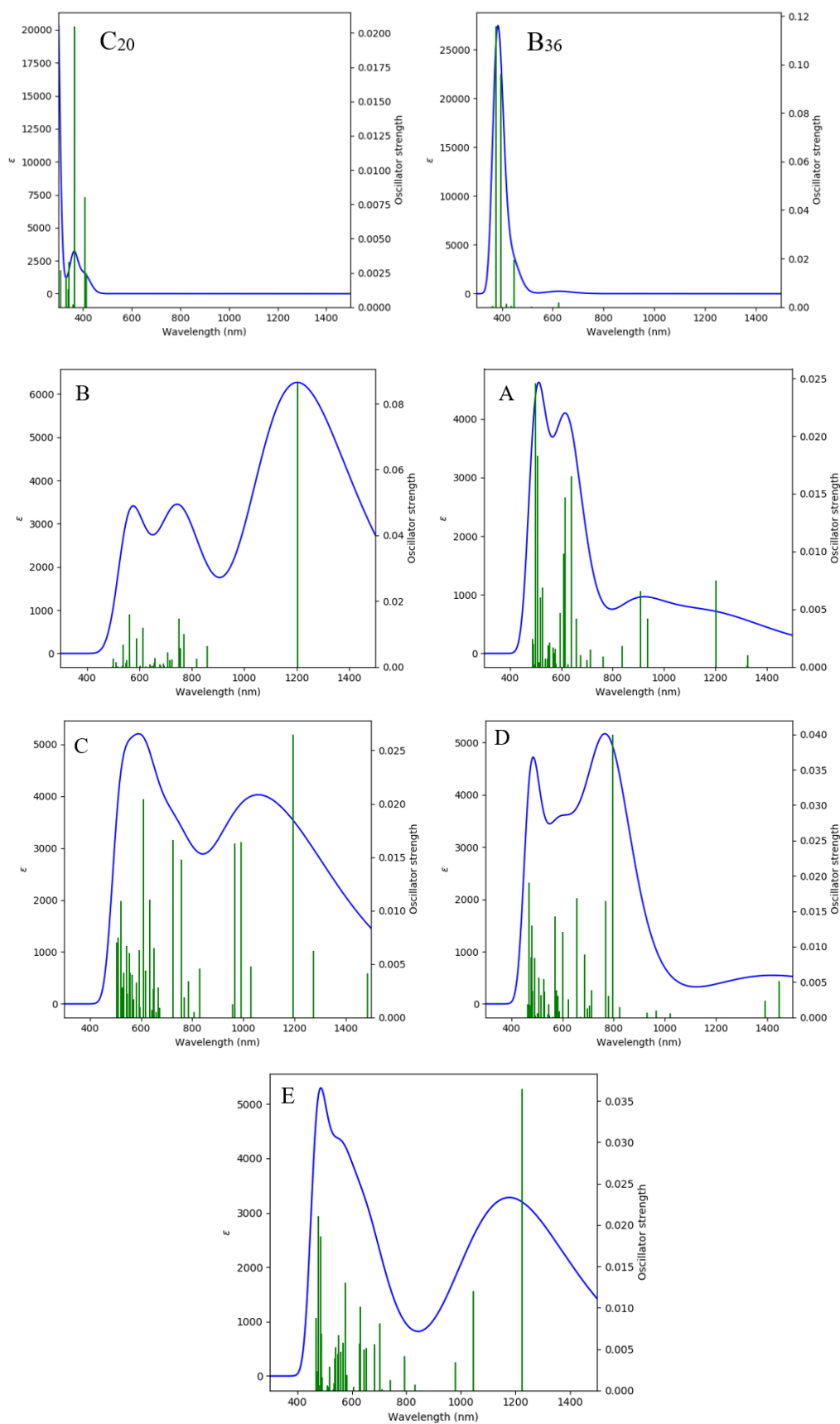
جدول ۹: مقادیر قطبش‌پذیری، ابرقطبش‌پذیری و گشتاور دو قطبی در ساختارهای منتخب نانوخشه‌های بور-کربن

i (D)	$\hat{a}$ (a.u.)	$\hat{a}$ (a.u.)	پیکربندی
۰/۸۰۸۹	۷۵۷/۳۱	۵۶۹/۴۲	B ₃₆
۰/۰۰۰۰۰۰	۳۰/۷۵	۱۶۶/۷۳	C ₂₀
۱/۹۲۲۱	۱۸۴۵/۱۲	۷۰۳/۲۲	A
۳/۰۷۸۱	۳۳۸۲۱/۴۶	۷۸۴/۳۵	B
۰/۶۱۱۵	۳۱۳۳/۱۱	۷۹۰/۹۹	C
۲/۴۵۱۱	۹۱۷۴/۲۵	۷۹۷/۷۹	D
۰/۸۳۵۰	۳۲۰۷۳/۳۶	۷۴۶/۸۰	E

فوتونیک، لیزر و اپتوالکترونیک دارای اهمیت بالایی هستند.

در ادامه، به‌منظور بررسی دقیق‌تر رفتار نوری ترکیبات B₃₆، C₂₀ و نانوغنچه‌های مشتق‌شده از آن‌ها، طیف‌های جذب UV-Vis این ساختارها مورد محاسبه و تحلیل قرار گرفت. نتایج حاصل، که در شکل ۸ ارائه شده‌اند، تفاوت‌های قابل‌توجهی در ویژگی‌های جذب نوری این ترکیبات را نشان می‌دهند که می‌تواند بر کاربردهای بالقوه آن‌ها در زمینه‌های مختلف اثرگذار باشد. بررسی طیف جذب ساختارهای منفرد B₃₆ و C₂₀ نشان می‌دهد که هر دو ترکیب دارای پیک‌های جذب در ناحیه فرابنفش

گشتاور دوقطبی صفر و مقادیر بسیار پایین برای α و β است و در نتیجه از نظر نوری غیرفعال تلقی می‌شود. پیکربندی‌های E و D نیز با مقادیر بالا برای β به ترتیب ۳۲۰۷۳/۳۶ a.u. و ۹۱۷۴/۲۵ a.u. دارای عملکرد نوری غیرخطی قابل‌توجهی هستند. ساختار A نیز با مقدار قابل‌توجه گشتاور دوقطبی ($\mu = ۱/۹۲$ D) و فوق‌قطبش‌پذیری مناسب، می‌تواند گزینه‌ای مطلوب برای بررسی بیشتر در زمینه کاربردهای اپتیکی باشد. به‌طور کلی، این نتایج نشان می‌دهند که اصلاح ساختاری هدفمند می‌تواند پاسخ نوری ترکیبات را به‌طور مؤثری بهبود دهد؛ به‌ویژه در زمینه مواد با خواص نوری غیرخطی بالا که در فناوری‌های



شکل ۸: طیف‌های جذب نوری (UV-Vis) خوشه‌های C_{20} ، B_{36} و نانوغنچه‌های مشتق شده

پتانسیل تقویت شده این ترکیبات در کاربردهای NLO است. این مقایسه ها نشان می دهد که طراحی ترکیبات با استفاده از خوشه های B_{36} و C_{20} می تواند مسیر جدیدی برای بهبود خواص الکترونی و نوری در ساختارهای دو جزئی فراهم آورد.

۴- نتیجه گیری

در این مطالعه، مجموعه ای از نانوغنچه های بور-کربن شامل بروفن B_{36} و فولرن C_{20} با چندین پیکربندی مختلف طراحی و بهینه سازی شدند. نتایج آنالیز فرکانسی نشان داد که تمامی ساختارهای پیشنهادی پایداری دینامیکی مناسبی دارند و در نقاط مینیمم انرژی قرار گرفته اند. تحلیل انرژی پیوستگی نیز بیانگر پایداری ترمودینامیکی مطلوب این نانوغنچه ها بود، به ویژه ساختار فولرن C_{20} با بالاترین انرژی پیوستگی، که نشان دهنده ثبات ساختاری بالاتر آن است. بررسی خواص الکتریکی و طیف چگالی حالت ها نشان داد که نانوغنچه های طراحی شده گاف انرژی کمتری نسبت به ساختارهای مرجع دارند که این موضوع به افزایش رسانایی الکترونی و پتانسیل بالاتر برای کاربردهای نیمه رسانایی اشاره دارد. همچنین، آنالیز انتقال بار (Qt) بیانگر برهم کنش مؤثر بین فولرن و بروفن در نانوغنچه ها است که در برخی پیکربندی ها مانند پیکربندی B منجر به افزایش رسانایی و واکنش پذیری بالاتر می شود. پارامترهای مشتق شده از نظریه تابع چگالی نشان دادند که پیکربندی B دارای بیشترین واکنش پذیری و الکتروفیلی است، در حالی که فولرن C_{20} پایدارترین ساختار الکترونیکی محسوب می شود. مطالعات خواص نوری غیرخطی (NLO) نیز تأکید کردند که با تغییر ساختار، پاسخ نوری نانوغنچه ها قابل بهبود است؛ به طوری که پیکربندی B با بیشترین فوق قطبش پذیری و گشتاور دوقطبی، بهترین عملکرد نوری را ارائه داد. در نهایت، محاسبات انرژی پراکندگی نشان داد که بیشترین سهم انرژی پراکندگی مربوط به ساختار A با مقدار kcal/mol

(زیر ۴۰۰ نانومتر) هستند؛ موضوعی که احتمالاً ناشی از اندازه کوچک خوشه ها است. به ویژه C_{20} به عنوان کوچک ترین فولرن شناخته شده، جذب بسیار شدیدی در این ناحیه دارد. در مقابل، ساختار B_{36} نیز با وجود تفاوت در ساختار، رفتاری مشابه نشان داده اما شدت جذب در آن کمتر و پهنای باند آن گسترده تر است. با تشکیل نانوغنچه های مشتق شده از این خوشه ها (ساختارهای A تا E)، تغییرات قابل توجهی در طیف های جذب از جمله انتقال جذب به ناحیه طول موج های بلندتر (محدوده مرئی) و ظهور چندین پیک جذب جدید مشاهده شد. برای نمونه، ساختارهای B و E به ترتیب دارای پیک قوی در نواحی ۲۲۰۰ و ۱۲۰۰ نانومتر هستند. این انتقال می تواند ناشی از افزایش اندازه ساختار، کاهش گاف انرژی، افزایش تعداد حالت های الکترونی مجاز و بروز برهم کنش بین اجزای خوشه ها باشد. به طور کلی، در حالی که خوشه های منفرد B_{36} و C_{20} با جذب در ناحیه فرابنفش می توانند در کاربردهای مرتبط با اشعه UV مفید باشند، نانوغنچه های تشکیل شده از این ترکیبات، به دلیل انتقال جذب به ناحیه مرئی، گزینه های بسیار مناسبی برای کاربردهای نوری مختلف به شمار می روند. همچنین پهنای باند جذب گسترده تر این نانوغنچه ها می تواند منجر به بهبود کارایی آن ها در جذب نور خورشید در بازه ی وسیع تری از طول موج ها شود.

برای ارزیابی بهتر نتایج به دست آمده، مقایسه ای میان مقادیر گاف انرژی و خواص نوری غیرخطی (NLO) ترکیبات طراحی شده با داده های گزارش شده در مطالعات پیشین انجام گرفت. به عنوان نمونه، در مطالعه ای نظری بر روی نانوغنچه های کربنی [۳۹، ۴۰]، گاف انرژی در محدوده ۳/۱۰-۱/۸۰ eV الکترون ولت گزارش شده که با مقادیر مشاهده شده برای پیکربندی های A تا E مطابقت قابل قبولی دارد. همچنین، مقدار فوق قطبش پذیری (β) در ساختارهای بور-کربنی مشابه [۴۱] بین ۵۰۰-۶۰۰۰ a.u. گزارش شده است، در حالی که پیکربندی های طراحی شده در این مطالعه، به ویژه ساختار B، مقادیری بالاتر از این بازه نشان می دهند ($\beta = ۳۳۸۲۱/۴۶$ a.u.) که بیانگر

growth mechanisms, preparation and applications,” Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, Vol. 32, no. 5, pp. 415-429, 2024. <https://doi.org/10.1080/1536383X.2023.2292694>

- [5] Roy, A., Gupta, A., Haque, B., Qureshi, A. A., Verma, D., Sharma, K., ... & Verma, R., “An updated review on carbon nanomaterials: Types, synthesis, functionalization and applications, degradation and toxicity,” Green Processing and Synthesis, Vol. 13, no. 1, p. 20240150, 2024. <https://doi.org/10.1515/gps-2024-0150>
- [6] Anoshkin, I. V., Nasibulin, A. G., Mudimela, P. R., Raula, J., Ermolov, V., & Kauppinen, E. I., “Selective chemical functionalization of carbon nanobuds,” Carbon, Vol. 50, no. 11, pp. 4171-4174, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2012.04.066>
- [7] Chen, T. W., Kalimuthu, P., Veerakumar, P., Lin, K. C., Chen, S. M., Ramachandran, R., ... & Chitra, S., “Recent developments in carbon-based nanocomposites for fuel cell applications: a review,” Molecules, Vol. 27, no. 3, p. 761, 2022. <https://doi.org/10.3390/molecules27030761>
- [8] Veeman, D., Shree, M. V., Sureshkumar, P., Jagadeesha, T., Natrayan, L., Ravichandran, M., & Paramasivam, P., “Sustainable development of carbon nanocomposites: synthesis and classification for environmental remediation,” Journal of Nanomaterials, Vol. 2021, no. 1, p. 5840645, 2021. <https://doi.org/10.1155/2021/5840645>
- [9] Nasibulin, A. G., Anisimov, A. S., Pikhitsa, P. V., Jiang, H., Brown, D. P., Choi, M., & Kauppinen, E. I., “Investigations of NanoBud formation,” Chemical Physics Letters, Vol. 446, no. 1-3, pp. 109-114, 2007. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2007.08.050>
- [10] Wu, Z., Zhao, Y., Yang, K., Guan, J., Wang, S., Gu, Y., ... & Ritchie, R. O., “Enhancing the mechanical performance of fiber-reinforced polymer composites using carbon nanotubes as an effective nano-phase reinforcement,” Advanced materials interfaces, Vol. 10, no. 3, p. 2201935, 2023. <https://doi.org/10.1002/admi.202201935>
- [11] Yahyazadeh, A., Nanda, S., & Dalai, A. K., “Carbon nanotubes: A review of synthesis methods and applications,” Reactions, Vol. 5, no. 3, pp. 429-451, 2024. <https://doi.org/10.3390/reactions5030022>
- [12] Qamar, M. A., Aroosh, K., Nawaz, A., Almarshnowi, M. Y., & Alnasir, M. H., “Carbon nanotubes in perovskite solar cells: A comprehensive review of recent developments and future directions,” Synthetic Metals, Vol. 307, p. 117651, 2024. <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2024.117651>
- [13] Deshmukh, M. A., Park, S. J., Hedau, B. S., & Ha, T. J., “Recent progress in solar cells based on carbon nanomaterials,” Solar Energy, Vol. 220, pp. 953-990,

۵۹/۱۴- و کمترین آن مربوط به ساختار C_{20} با مقدار $۱۵/۴۴ \text{ kcal/mol}$ می‌باشد. مقدار منفی بیشتر انرژی پراکندگی بیانگر برهم‌کنش‌های غیریونی قوی‌تر و پایداری و اندروالسی بالاتر است که بایستی در طراحی نانومواد با دقت مورد توجه قرار گیرند. در نتیجه این تحقیق نشان داده شد که تشکیل نانو غنچه از B_{36} و C_{20} امکان‌پذیر بوده و نانوغنچه‌های بور-کربن طراحی شده در این پژوهش، به ویژه پیکربندی B، دارای خواص الکترونیکی، نوری و ترمودینامیکی مناسبی هستند که می‌توانند گزینه‌های جذابی برای کاربردهای فوتونیک، اپتوالکترونیک و نانوفناوری باشند.

تشکر و قدردانی

نویسندگان مراتب قدردانی خود را از دانشگاه لرستان به خاطر حمایت مالی از این پژوهش ابراز می‌دارند.

تعارض منافع

نویسندگان این مقاله بدین‌وسیله اعلام می‌دارند که در ارتباط با انجام، تحلیل، نگارش و انتشار این پژوهش، هیچ‌گونه تعارض منافع مالی، شخصی، علمی یا سازمانی وجود ندارد.

منابع

- [1] Chang, X., Xu, Y., & von Delius, M., “Recent advances in supramolecular fullerene chemistry,” Chemical Society Reviews, Vol. 53, no. 1, pp. 47-83, 2024. <https://doi.org/10.1039/D2CS00937D>
- [2] Sam, M., and S. Akbari, “An overview of functionalized fullerenes and their applications in industry,” 2024.
- [3] Wang, Han, Zhiyuan Zhang, Chenyang Zhang, Yiguo Yao, and Kai Wang, “Structural modification of fullerene derivatives for high-performance inverted perovskite solar cells,” Journal of Materials Chemistry A, 2024. <https://doi.org/10.1039/D4TA03900A>
- [4] Wang, P., Dong, Q., Gao, C., Bai, W., Chu, D., & He, Y., “A comprehensive review of carbon nanotubes:

- doi.org/10.1007/978-3-319-22282-0_1
- [25] Sun, H., Li, Q., & Wan, X. G, "First-principles study of thermal properties of borophene," *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 18, no. 22, pp. 14927-14932, 2016. <https://doi.org/10.1039/C6CP02029A>
- [26] Ou, M., Wang, X., Yu, L., Liu, C., Tao, W., Ji, X., & Mei, L, "The emergence and evolution of borophene," *Advanced Science*, Vol. 8, no. 12, p. 2001801, 2021. <https://doi.org/10.1002/adv.202001801>
- [27] Li, D., Gao, J., Cheng, P., He, J., Yin, Y., Hu, Y., ... & Zhao, J, "2D boron sheets: structure, growth, and electronic and thermal transport properties," *Advanced Functional Materials*, Vol. 30, no. 8, p. 1904349, 2020. <https://doi.org/10.1002/adfm.201904349>
- [28] Li, D., Chen, Y., He, J., Tang, Q., Zhong, C., & Ding, G, "Review of thermal transport and electronic properties of borophene," *Chinese Physics B*, Vol. 27, no. 3, p. 036303, 2018. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/27/3/036303>
- [29] Zhour, K., Otero-Mato, J. M., Hassan, F. E. H., Fahs, H., Vaezzadeh, M., López-Lago, E., ... & Varela, L. M, "Electronic and optical properties of borophene and graphene with an adsorbed ionic liquid: A density functional theory study," *Journal of Molecular Liquids*, Vol. 316, p. 113803, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.113803>
- [30] Adekoya, G. J., Adekoya, O. C., Muloiwa, M., Sadiku, E. R., Kupolati, W. K., & Hamam, Y, "Advances in borophene: synthesis, tunable properties, and energy storage applications," *Small*, Vol. 20, no. 40, p. 2403656, 2024. <https://doi.org/10.1002/sml.202403656>
- [31] Ou, M., Wang, X., Yu, L., Liu, C., Tao, W., Ji, X., & Mei, L, "The emergence and evolution of borophene," *Advanced Science*, Vol. 8, no. 12, p. 2001801, 2021. <https://doi.org/10.1002/adv.202001801>
- [32] Frisch, M. J. E. A, "gaussian 09, Revision d. 01, Gaussian," Inc, Wallingford CT, Vol. 201, 2009.
- [33] Becke, A. D, "Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior," *Physical review A*, Vol. 38, no. 6, p. 3098, 1988. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.38.3098>
- [34] Heidari Nezhad Janjanpour, M., Vakili, M., Daneshmehr, S., Jalalierad, K., & Alipour, F, "Study of the ionization potential, electron affinity and HOMO-LUMO gaps in the small fullerene nanostructures," *Chemical Review and Letters*, Vol. 1, no. 2, pp. 45-48, 2018.
- [35] Peach, M. J., Helgaker, T., Salek, P., Keal, T. 2021. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.04.001>
- [14] Dubey, R., Dutta, D., Sarkar, A., & Chattopadhyay, P, "Functionalized carbon nanotubes: Synthesis, properties and applications in water purification, drug delivery, and material and biomedical sciences," *Nanoscale Advances*, Vol. 3, no. 20, pp. 5722-5744, 2021. <https://doi.org/10.1039/D1NA00293G>
- [15] Munteanu, R. E., Moreno, P. S., Bramini, M., & Gáspár, S, "2D materials in electrochemical sensors for in vitro or in vivo use," *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, Vol. 413, pp. 701-725, 2021. <https://doi.org/10.1007/s00216-020-02831-1>
- [16] Alhajji, E., Zhang, F., & Alshareef, H. N, "Status and prospects of laser-induced graphene for battery applications," *Energy Technology*, Vol. 9, no. 10, p. 2100454, 2021. <https://doi.org/10.1002/ente.202100454>
- [17] Wu, M., Xiao, Y., Zeng, Y., Zhou, Y., Zeng, X., Zhang, L., & Liao, W, "Synthesis of two-dimensional transition metal dichalcogenides for electronics and optoelectronics," *InfoMat*, Vol. 3, no. 4, pp. 362-396, 2021. <https://doi.org/10.1002/inf2.12161>
- [18] Das, B. C., Thapa, P., Karki, R., Schinke, C., Das, S., Kambhampati, S., ... & Evans, T, "Boron chemicals in diagnosis and therapeutics," *Future medicinal chemistry*, Vol. 5, no. 6, pp. 653-676, 2013. <https://doi.org/10.4155/fmc.13.38>
- [19] He, C., & Zhong, J. X, "Structures, stability, mechanical and electronic properties of α -boron and α^* -boron," *Aip Advances*, Vol. 3, no. 4, 2013. <https://doi.org/10.1063/1.4804138>
- [20] Tian, Y., Guo, Z., Zhang, T., Lin, H., Li, Z., Chen, J., ... & Liu, F, "Inorganic boron-based nanostructures: Synthesis, optoelectronic properties, and prospective applications," *Nanomaterials*, Vol. 9, no. 4, p. 538, 2019. <https://doi.org/10.3390/nano9040538>
- [21] Wang, K., Choyal, S., Schultz, J. F., McKenzie, J., Li, L., Liu, X., & Jiang, N, "Borophene: Synthesis, Chemistry, and Electronic Properties," *ChemPlusChem*, Vol. 89, no. 10, e202400333, 2024. <https://doi.org/10.1002/cplu.202400333>
- [22] Zhao, Y., Zeng, S., & Ni, J, "Phonon-mediated superconductivity in borophenes," *Applied Physics Letters*, Vol. 108, no. 24, 2016. <https://doi.org/10.1063/1.4953775>
- [23] Bilgiç, G, "Review of properties, synthesis, and energy applications of borophene, a novel boron-based 2D material," *Journal of Boron*, Vol. 9, no. 2, pp. 82-95, 2024. <https://doi.org/10.30728/boron.1442569>
- [24] Popov, I. A., & Boldyrev, A. I, "Classical and multicenter bonding in boron: two faces of boron," *Boron: The Fifth Element*, pp. 1-16, 2015. https://doi.org/10.1007/978-94-007-5888-8_1

- Semiconductor Processing, Vol. 165, p. 107661, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2023.107661>
- [39] Mirderikvand, F., & Shamlouei, H. R., "Novel nanobuds from C20 with C30, C40, C50, C60 and C70 fullerene: Structural, electrical and optical properties and solvent effect," Journal of Molecular Liquids, Vol. 377, p. 121550, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.121550>
- [40] Azadi, A., & Shamlouei, H. R., "DFT design of novel nano-bud from B12N12 and C60 fullerene," Diamond and Related Materials, Vol. 136, p. 109909, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2023.109909>
- [41] Shamlouei, H. R., & Azadi, A., "Novel nanobuds from the combination of B12N12 nanocage and carbon nanotube: Design and DFT study," Synthetic Metals, Vol. 307, 117690, 2024. <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2024.117690>
- W., Lutnæs, O. B., Tozer, D. J., & Handy, N. C., "Assessment of a Coulomb-attenuated exchange-correlation energy functional," Physical Chemistry Chemical Physics, Vol. 8, 5, no. 558-562, 2006. <https://doi.org/10.1039/B511865D>
- [36] Buckingham, A. D., "Permanent and induced molecular moments and long-range intermolecular forces," Advances in chemical physics: Intermolecular forces, pp. 107-142, 1967. <https://doi.org/10.1002/9780470143582.ch2>
- [37] Yanai, T., Tew, D. P., & Handy, N. C., "A new hybrid exchange-correlation functional using the Coulomb-attenuating method (CAM-B3LYP)," Chemical physics letters, Vol. 393, no. 1-3, pp. 51-57, 2004. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.06.011>
- [38] Azadi, A., & Shamlouei, H. R., "Hybridization of B12N12 and C50 fullerene for the design of new nanobuds: A DFT study," Materials Science in