

The Effect of Height and Disclination Angle of Boron Nitride Nanocones on Electronic and Structural Properties: DFT

Fahimeh Shojaie

Associate Professor, Semiconductors Group, Institute of Science and High Technology and Environmental Sciences, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran

*Corresponding Author's Email: f.shojaie@kgut.ac.ir**Paper History:**

Received: 2023-04-29
Revised in revised form: 2023-05-27
Scientific Accepted: 2023-08-29

Keywords:

Boron Nitride Nanocones,
Density Functional Theory,
Height and Disclination Angles,
Density of States,
Anisotropic Polarization

Abstract Compared with carbon nanocones, Boron Nitride Nanocones (BNNCs) are characterized by different physical, chemical, and electronic properties. Since BNNCs are in three types of covalent bonds (B-N), B-B, and (N-N), carbon nanocones contain only C-C bonds. Given that the structural properties of nano cones depend on the disclination angle of the cone, the current study aims to discuss the electronic and structural properties of boron nitride nanocones in different sizes (height and disclination angle) using Density Functional Theory (DFT) calculations. To this end, the relevant calculations were done for boron nitride nanocones with the cone heights of 1 to 5 angstroms at the disclination angle of 60° , 3 to 7 angstroms at the disclination angle of 120° , and 4 to 8 angstroms at the disclination angles of 180° and 240° . In this work, the density of states, quantum parameters, analysis of bond order, bond length, polarizability, anisotropic polarization, dipole moment, atomic charges, and frequencies were calculated using the DFT. According to the results, the best structure was identified based on the height and disclination angles to be further used in the next calculations. It is hoped that the results of this project can be useful in expanding the experimental works and effective in the design of nanocones as well in order to absorb gases, drugs, etc.



<https://doi.org/10.30501/jamt.2023.395053.1275> URL: https://www.jamt.ir/article_178928.html

1. INTRODUCTION

Nanocones are considered intermediate structures between nanotubes and graphene, hence an interesting structure for technological applications. Their shape facilitates their applications in the storage as well as absorption of gases of gases such as hydrogen ([Hsieh et al., 2009](#); [Liao, 2012](#); [Sripirom et al., 2011](#)). Boron Nitride Nanocones (BNNCs) are a type of BN nanostructures with hollow structures made of boron and nitrogen that are conical in shape. Considerable research has been done on the BN nanocones with the density functional theory calculations ([Doroudi & Jalali Sarvestani, 2020](#); [Mirzaei et al., 2012](#)). However, no study has been carried out on the effect of the height and disclination angle of the boron nitride nanocones on their structural properties. In this regard, for the first time, this study attempts to investigate the effect of height and disclination angle of the boron nitride nanocones on their structural and electronic properties in order to determine how charge would be distributed through the molecule.

2. MATERIALS AND METHODS

Computational simulation for the BNNCs structures

in gas phase was performed using Gaussian 09 program ([Frisch et al., 2010](#)) by Becke's three-parameter Lee-Yang-Parr hybrid functional (B3LYP) ([Becke, 1992](#)) with cc-pvdz basis set. In addition, frequency calculations were done through the DFT/B3LYP/cc-pvdz method. Both DFT and B3LYP methods have been widely used in calculations ([Arjmandi et al., 2018](#); [Kalantarian, 2019](#)). In the DFT calculations, the cost of analysis is greatly reduced, and experimental errors are eliminated. In addition, they give us excellent insights into the structural geometric changes, mutual energy, and load distribution in the encapsulation process. It should be noted that the B3LYP Method is one of the most accurate methods for calculating energy ([López & Illas, 1998](#)). The frequencies of all structures are positive, indicating that there is a minimum of energy on the potential energy level in all BNNCs structures. The Hirshfeld and Atomic Dipole Moment Corrected Hirshfeld (ADCH) ([Lu & Chen, 2012a](#)) charges was performed using a Multifunctional Wavefunction (Multiwfn) Analyzer ([Lu & Chen, 2012b](#)). The charges, calculated through these methods, give information



about charge concentration or depletion on each atomic site. Both Mayer Bond Order (MBO) (Mayer, 1983) and Fuzzy Bond Order (FBO) (Mayer & Salvador, 2004) of the BNNCs structures were calculated based on the Multiwfn code. The quantum chemical parameters can be also used to obtain information about the chemical reactivity of the molecules. The most important of these descriptors are energy gap (E_g), global hardness (η), and electronegativity (χ). To determine the nonlinear optical properties of the studied compounds, the values of polarizability (α), polarizability anisotropy ($\Delta\alpha$), and dipole moment (μ) should be calculated.

3. RESULTS AND DISCUSSION

Table 1 confirms the low energy gap (low global hardness) of $B_{38}N_{42}H_{20}$ when compared to other complexes with the disclination angle 60° ; therefore, it has more reactivity than others. While comparing electronegativity, it can be concluded that $B_5N_5H_{10}$ complex tends to absorb more electron than other complexes at the disclination angle of 60° . In these structures, as the height of the nano-cone increases, the average lengths of the bond, dipole moment, polarizability, and anisotropy polarizability will increase while the average orders of the bond will decrease. Thus, in the $B_2N_3H_5$ molecule, the average bond lengths of B-N and N-N reach their lowest value while the average bond order reaches its highest value in

both methods. According to the findings, $B_{38}N_{42}H_{20}$ has the highest dipole moment, polarizability, and anisotropy polarizability; in other words, this molecule is softer and more reactive than other ones. In the BNNCs structures with the disclination angle 120° , $B_{24}N_{24}H_{24}$ has less energy gap, less hardness, and thus more reactivity. $B_{12}N_{12}H_{16}$ has the highest electronegativity and for this reason, it tends to absorb more electrons. $B_{32}N_{32}H_{16}$ has the minimum value of average bond length and the maximum dipole moment, polarizability, and anisotropy polarizability. Among the BNNCs structures with the disclination angle of 180° , $B_{22}N_{26}H_{12}$ has more reactivity due to its less energy gap and hardness. $B_{22}N_{26}H_{12}$ has the highest value of the average bond order, dipole moment, polarizability, and anisotropy polarizability as well as the lowest value of the average bond length of N-N in the BNNCs with the disclination angle of 180° . $B_9N_9H_{12}$ has the lowest value of the average bond order and the highest value of the average bond length of N-N. In BNNCs structures with the disclination angle of 240° , $B_{14}N_{14}H_{10}$ has more reactivity (the lowest energy gap and hardness but the highest dipole moment, polarizability, and anisotropy polarizability), and it also tends to absorb more electrons. $B_4N_4H_6$ has the highest value of the average bond length. As the height of nano-cone increases, the average bond length between the boron and nitrogen atoms decreases.

Table 1. The gap energy, global hardness, electronegativity, polarizability, polarizability anisotropy and dipole moment for the studied compound

Disclination angle	Complex	E_g (eV)	η (eV)	χ (eV)	μ_{tot} (D)	$\alpha_{tot} \cdot 10^{-23}$ (esu)	$\Delta\alpha \cdot 10^{-23}$ (esu)
60	$B_2N_3H_5$	6.969	3.484	2.461	1.360	0.639	0.384
	$B_5N_5H_{10}$	5.332	2.666	3.851	1.915	1.467	1.031
	$B_{15}N_{15}H_{20}$	4.891	2.446	3.283	3.064	4.186	2.614
	$B_{21}N_{24}H_{15}$	4.927	2.463	2.664	5.107	5.661	3.674
	$B_{38}N_{42}H_{20}$	4.683	2.341	2.604	7.031	10.306	6.833
120	$B_8N_8H_8$	6.730	3.365	3.613	2.611	1.934	0.813
	$B_{12}N_{12}H_{16}$	6.017	3.008	3.893	1.829	3.186	1.516
	$B_{18}N_{18}H_{12}$	6.232	3.116	3.727	4.069	4.344	1.677
	$B_{24}N_{24}H_{24}$	5.792	2.896	3.688	4.359	6.223	2.379
	$B_{32}N_{32}H_{16}$	6.320	3.160	3.557	5.352	7.874	3.002
180	$B_5N_7H_6$	5.145	2.573	3.617	4.664	1.361	0.315
	$B_9N_9H_{12}$	5.610	2.805	4.404	6.478	2.420	0.841
	$B_{12}N_{15}H_9$	4.755	2.377	3.515	5.503	3.043	0.447
	$B_{18}N_{18}H_{18}$	4.733	2.366	3.551	8.651	4.566	0.848
	$B_{22}N_{26}H_{12}$	4.157	2.079	3.161	8.747	5.520	0.461
240	$B_4N_4H_6$	6.888	3.444	3.493	2.960	0.987	0.109
	$B_6N_6H_{10}$	5.978	2.989	3.680	2.607	1.632	0.439
	$B_7N_7H_8$	5.672	2.836	3.759	1.462	1.722	0.250
	$B_{10}N_{10}H_{10}$	5.471	2.735	4.012	1.311	2.448	0.662
	$B_{14}N_{14}H_{10}$	5.265	2.633	4.023	4.557	3.252	0.689

Density of States (DOS) spectra may help gain a deeper understanding of the BNNCs structures. The DOS for these structures were calculated and plotted in Figure 1, showing that the DOS increases upon increasing the cone height in the optimized BNNCs structures. It should be noted that DOS spectra follows

a trend similar to that of energy gap. The difference between the minimum and maximum energy gap at the disclination angles 60° , 120° , 180° , and 240° is equal to 2.286, 0.938, 1.453 and 1.623 angstroms, respectively, and these differences can also be seen in Figure 1.

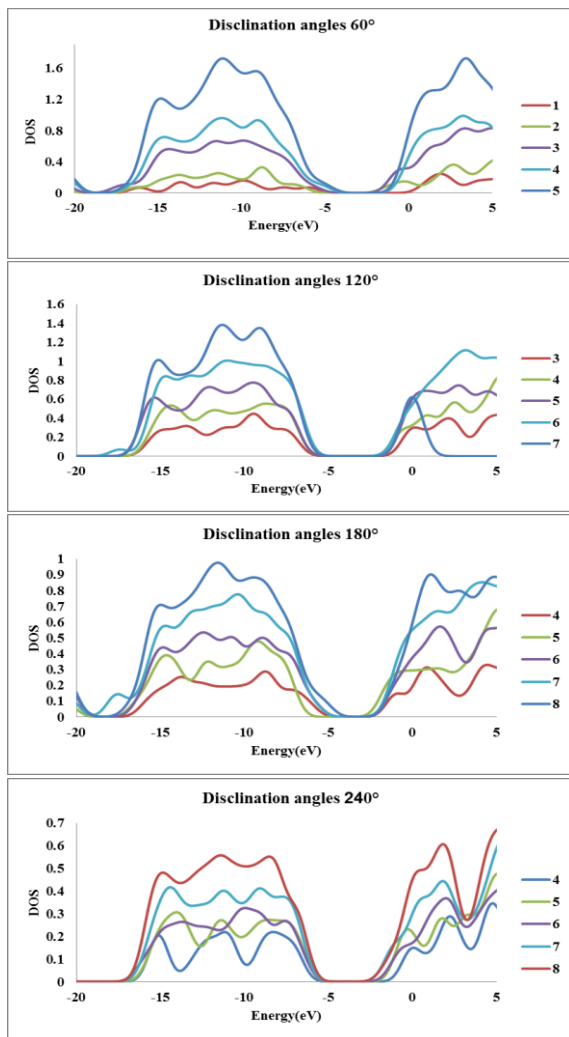


Figure 1. DOS of geometrically optimized for BNNCs structures with disclination angle 60° , 120° , 180° and 240° and the cone heights 1-5Å, 3-7Å, 4-8Å, and 4-8Å, respectively.

4. CONCLUSION

In order to better understand the effect of the height and disclination angle of nanocones on the calculations of the structural properties, the heights of the selected cone were assumed to be 1 to 5, 3 to 7, 4 to 8, and 4 to 8 Å at the disclination angles of 60° , 120° , 180° , and 240° , respectively. The findings of this study are summarized in the following:

- 1- In the DOS diagrams, the energy gap was in the range of HOMO and LUMO energies.
- 2- The bond order among all atoms was the first order, and the results of the MBO method were almost the same as the FBO method.
- 3- Analysis of the atomic charges using Hirshfeld and ADCH methods showed that all nitrogen atoms had a negative charge while all boron atoms had a positive charge.
- 4- The IR spectrum results revealed that the highest vibration frequencies were attributed to the

stretching modes of the last ring, and the vibration frequencies of N-H or H-N-H stretching modes were higher than those of B-H or H-B-H stretching modes. The highest intensity resulted from the deformation state of the nanocone.

5. ACKNOWLEDGEMENT

This work was supported by 1624 project from the Semiconductors Group, Institute of Science and High Technology and Environmental Sciences, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran.

6. REFERENCES

1. Arjmandi, M., Pourafshari Chenar, M., Peyravi, M., Jahanshahi, M., Arjmandi, A., & Shokui Rad, A. (2018). Interpreting the CO₂ adsorption on functionalized organic group of IRMOF-1: A B3LYP DFT based study. *International Journal of Engineering*, 31(9), 1473-1479. https://www.ije.ir/article_73300.html
2. Becke, A. D. (1992). Density-functional thermochemistry. I. The effect of the exchange-only gradient correction. *The Journal of Chemical Physics*, 96(3), 2155-2160. <https://doi.org/10.1063/1.464913>
3. Doroudi, Z., & Jalali Sarvestani, M. R. (2020). Boron nitride nanocone as an adsorbent and sensor for Ampicillin: A Computational Study. *Chemical Review and Letters*, 3(3), 110-116. <https://doi.org/10.22034/crl.2020.233274.1061>
4. Frisch, M., Trucks, G., Schlegel, H., Scuseria, G., Robb, M., Cheeseman, J., Scalmani, G., Barone, V., Mennucci, B., & Petersson, G. (2010). Gaussian 09w, Gaussian 09, Rev. A. 02; Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, USA.
5. Hsieh, J.-Y., Chen, C., Chen, J.-L., Chen, C.-I., & Hwang, C.-C. (2009). The nanoindentation of a copper substrate by single-walled carbon nanocone tips: a molecular dynamics study. *Nanotechnology*, 20(9), 095709. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/9/095709>
6. Kalantarian, M.M., (2019). Theoretical Evaluation of Behaviours and Properties of LiFePO₄ as Li-ion Battery Cathode Material: a DFT Study. *Journal of Advanced Materials and Technologies*, 8 (1), 45. <https://doi.org/10.30501/jamt.2019.88927>
7. Liao, M.-L. (2012). A study on hydrogen adsorption behaviors of open-tip carbon nanocones. *Journal of Nanoparticle Research*, 14(4), 837. <https://doi.org/10.1007/s11051-012-0837-1>
8. López, N., & Illas, F. (1998). Ab initio modeling of the metal-support interface: the interaction of Ni, Pd, and Pt on MgO (100). *The Journal of Physical Chemistry B*, 102(8), 1430-1436. <https://doi.org/10.1021/jp972626q>
9. Lu, T., & Chen, F. (2012a). Atomic dipole moment corrected Hirshfeld population method. *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, 11(01), 163-183. <https://doi.org/10.1142/S0219633612500113>
10. Lu, T., & Chen, F. (2012b). Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. *Journal of computational chemistry*, 33(5), 580-592. <https://doi.org/10.1002/jcc.22885>
11. Mayer, I. (1983). Charge, bond order and valence in the AB initio SCF theory. *Chemical Physics Letters*, 97(3), 270-274. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(83\)80005-0](https://doi.org/10.1016/0009-2614(83)80005-0)
12. Mayer, I., & Salvador, P. (2004). Overlap populations, bond orders and valences for 'fuzzy' atoms. *Chemical Physics Letters*, 383(3-4), 368-375. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2003.11.048>
13. Mirzaei, M., Yousefi, M., & Meskinfam, M. (2012). Chemical shielding properties for BN, BP, AlN, and AlP nanocones: DFT studies. *Superlattices and Microstructures*, 51(6), 809-813. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2012.03.028>
14. Sriprrom, J., Noor, S., Köhler, U., & Schulte, A. (2011). Easily made and handled carbon nanocones for scanning tunneling microscopy and electroanalysis. *Carbon*, 49(7), 2402-2412. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2011.02.007>



مقاله کامل پژوهشی

تأثیر ارتفاع و زاویه رأس نانومخروط‌های بورنیتزیدی در خواص ساختاری و الکترونی:

نظریه تابعی چگالی

فهیمة شجاعی

دانشیار، گروه نیمه‌هادی‌ها، پژوهشگاه علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

تاریخچه مقاله:

ثبت اولیه: ۱۴۰۲/۰۲/۰۹

دریافت نسخه اصلاح‌شده: ۱۴۰۲/۰۳/۰۶

پذیرش قطعی: ۱۴۰۲/۰۴/۱۹

کلیدواژه‌ها:

نانومخروط‌های بورنیتزیدی،

نظریه تابعی چگالی،

ارتفاع و زاویه رأس،

چگالی حالت‌ها،

قطبش‌پذیری آنیزوتروپی

چکیده: خواص فیزیکی، شیمیایی و الکترونی نانومخروط‌های بورنیتزید با نانومخروط‌های کربنی متفاوت است، به‌طوری که نانومخروط‌های بورنیتزید دارای سه نوع پیوند کووالانسی در نانومخروط‌های بورنیتزید (B-N، B-B و N-N) هستند، درحالی‌که نانومخروط‌های کربنی فقط یک نوع پیوند کووالانسی C-C دارند. از آنجاکه خواص ساختاری نانومخروط‌ها با زاویه رأس مخروط ارتباط بسیاری دارد، پژوهش‌های بسیاری درباره ویژگی‌های الکترونی و ساختاری نانومخروط‌های بورنیتزید، در اندازه‌های گوناگون (ارتفاع و زاویه رأس)، با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی انجام شده است. محاسباتی درخصوص نانومخروط‌های بورنیتزید با ارتفاع مخروط ۱ تا ۵ آنگستروم برای زاویه رأس ۶۰ درجه، ۳ تا ۷ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۲۰ درجه و ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۸۰ و ۲۴۰ درجه انجام شده است. در این پژوهش، همچنین، چگالی حالت‌ها، پارامترهای کوانتومی، تجزیه و تحلیل مرتبه پیوند، طول پیوند، قطبش‌پذیری، قطبش‌پذیری آنیزوتروپی، ممان دوقطبی و فرکانس‌ها بررسی شده‌اند. با استفاده از نتایج به‌دست‌آمده، بهترین ساختار براساس ارتفاع و زاویه رأس تخمین زده شده است تا از آن در محاسبات بعدی استفاده شود. امید است که نتایج این طرح در کارهای تجربی و طراحی نانومخروط‌ها به‌منظور جذب گازها، داروها و غیره راهگشا باشد.



<https://doi.org/10.30501/jamt.2023.395053.1275> URL: https://www.jamt.ir/article_178928.html

۱- مقدمه

جالبی برای کاربردهای فناوری دارند. انتظار می‌رود که نانومخروط‌ها به‌عنوان منبع الکترون در دستگاه‌های نشر میدان و پروب^۱ روبشی استفاده شوند که کاربرد آن‌ها بستگی به ساختار ویژه نانومخروط‌ها خواهد داشت. همچنین، شکل نانومخروط‌ها باعث می‌شود که از آن‌ها در ذخیره‌سازی گازهایی مانند هیدروژن و همچنین جذب گازها استفاده شود ([Adisa et al., 2011](#); [Doroudi & Jalali Sarvestani, 2020](#); [Hsieh et al., 2009](#); [Liao, 2012](#); [Majidi & Tabrizi, 2010](#); [Sripirom et al., 2011](#); [Yu & Zheng, 2010](#); [Zhi et al., 2005](#)). نانومخروط‌ها دارای فضای خالی داخلی هستند و فضای سطحی آن‌ها از نانولوله‌ها بزرگ‌تر است. بنابراین،

در دهه‌های گذشته، تمرکز بر دانش سازوکار ساخت نانومخروط‌ها گسترش یافته و مطالعات بسیاری در این زمینه انجام شده است. دانشمندان خواص گرمایی و الکتریکی بسیاری برای نانومخروط‌های کربنی کشف کرده‌اند که پتانسیل کاربرد آن‌ها در ابزارهای نانوالکترومکانیکی پیشرفته را نشان می‌دهد. نانومخروط‌ها شکل جدیدی از نانو ساختار هستند که در سال ۱۹۹۲ به‌عنوان کلاه در انتهای نانولوله‌ها کشف شدند ([Lijima et al., 1992](#)). از آنجا که نانومخروط‌ها ساختار متوسط بین نانولوله‌ها و گرافن در نظر گرفته می‌شوند، ساختار

1. Scanning probe

*عهده‌دار مکاتبات: فهیمة شجاعی

نشانی: ایران، کرمان، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته

پیام نگار: f.shojaie@kgut.ac.ir

نانومخروط‌ها ممکن است مفیدتر از نانولوله‌ها باشند. با وجود استفاده بالقوه از نانومخروط‌های کربنی به‌عنوان دستگاه‌های ذخیره‌سازی گاز، ذخیره‌سازی گاز در نانومخروط‌های کربن از نانولوله‌های کربنی کمتر است؛ زیرا، برخلاف نانولوله‌های کربنی، توزیع بار در نانومخروط‌های کربنی وابسته به طول نیست، بلکه به تغییرات ساختار و نوع اتم‌های رأس آن‌ها بستگی دارد. ویژگی این ساختارها به‌شدت به زاویه رأس مخروط وابسته است. این ساختارها، به‌دلیل نوع پیوند و اتصالات قوی بین آن‌ها، خصوصیات ویژه‌ای نظیر سختی مکانیکی و رسانش الکترونی دارند. نانومخروط‌های بورنیتريد^۱ (BNNCs) نوعی نانو ساختار BN با ساختارهای توخالی، مخروطی‌شکل و ساخته‌شده از بور و نیتروژن هستند. نانومخروط‌های BN در مقایسه با نانومخروط‌های کربنی دارای خواص فیزیکی، شیمیایی و الکترونیکی متنوعی هستند؛ زیرا BNNCs دارای سه نوع پیوند کووالانسی (N-N و B-B، B-N) هستند، در حالی که نانومخروط‌های کربن فقط پیوندهای C-C دارند. نانومخروط‌های کربنی دارای پنج زاویه رأس (۶۰، ۱۲۰، ۱۸۰، ۲۴۰ و ۳۰۰ درجه) و نانومخروط‌های بورنیتريد دارای زاویه‌های رأس گوناگون به‌صورت تجربی سنتز شده‌اند. از این‌رو، خواص الکترونی نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه ۶۰، ۱۲۰، ۲۴۰ و ۳۰۰ درجه تحت‌تأثیر میدان‌های الکتریکی خارجی و همچنین ساختار هندسی نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه‌های ۶۰، ۱۲۰ و ۲۴۰ درجه با استفاده از محاسبات اولیه از لحاظ نظری بررسی شده‌اند. علاوه بر این، ساختار الکترونی، خواص مکانیکی و اثر میدان الکتریکی در ساختارهای مخروطی بورنیتريد با زاویه‌های گوناگون مطالعه شده‌اند ([Golberg et al., 2001](#); [Krungeleviciute et al., 2008](#); [Saadh et al., 2023](#)).

همچنین، تحقیقاتی درخصوص نانومخروط‌های BN با محاسبات نظریه تابعی چگالی انجام شده است. برای مثال، در ۲۰۱۳، نانومخروط کربنی و بورنیتريد را به‌عنوان حسگر برای آمونیاک شبیه‌سازی کردند که نتایج به‌دست‌آمده نشان داد که نانومخروط تمایل بیشتری به جذب اتم N در گاز آمونیاک دارد و این‌که نانومخروط می‌تواند به‌عنوان حسگر برای گاز آمونیاک استفاده شود ([Baei et al., 2013](#)). در ۲۰۱۲، رزونانس مغناطیس هسته‌ای نانومخروط‌های BN، BP، BN و AIP بررسی شد ([Mirzaei et](#)

[al., 2012](#)). در ۲۰۰۳، خواص الکترونی نانومخروط‌های BN تحت تأثیر میدان الکتریکی مطالعه شدند ([Machado et al., 2003](#)). گفتنی است که درخصوص تأثیر ارتفاع و زاویه رأس نانومخروط‌های بورنیتريدی در خواص ساختاری و رزونانس چهارقطبی هسته‌ای تاکنون تحقیقی انجام نشده است. در این پژوهش، برای اولین بار، خواص گوناگون نانومخروط‌ها در ارتفاع و زاویه‌های گوناگون بررسی شده است. امید است که نتایج این طرح در کارهای تجربی و طراحی نانومخروط‌ها به‌منظور جذب گازها، داروها و غیره راهگشا باشد. نتایج این طرح می‌تواند پاسخ‌گوی سؤالات زیر باشد: ارتفاع و زاویه رأس نانومخروط‌های بورنیتريد چه تأثیری در خواص ساختاری و الکترونی دارد؟ در نانومخروط‌های بورنیتريد، براساس ارتفاع و زاویه رأس، کدام ساختار پایدارتر است؟ بالاترین

فرکانس‌ها در نانومخروط‌های بورنیتريد مربوط به کدام مد کششی است؟ ارتفاع و زاویه رأس نانومخروط‌های بورنیتريد چه تأثیری در قطبش‌پذیری و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی دارد؟ با افزایش ارتفاع در نانومخروط‌های بورنیتريد توصیفگرهای کوانتومی، چگالی حالت‌ها و طول و مرتبه پیوند و بارهای اتمی چگونه تغییر می‌کند؟

۲- روش تحقیق

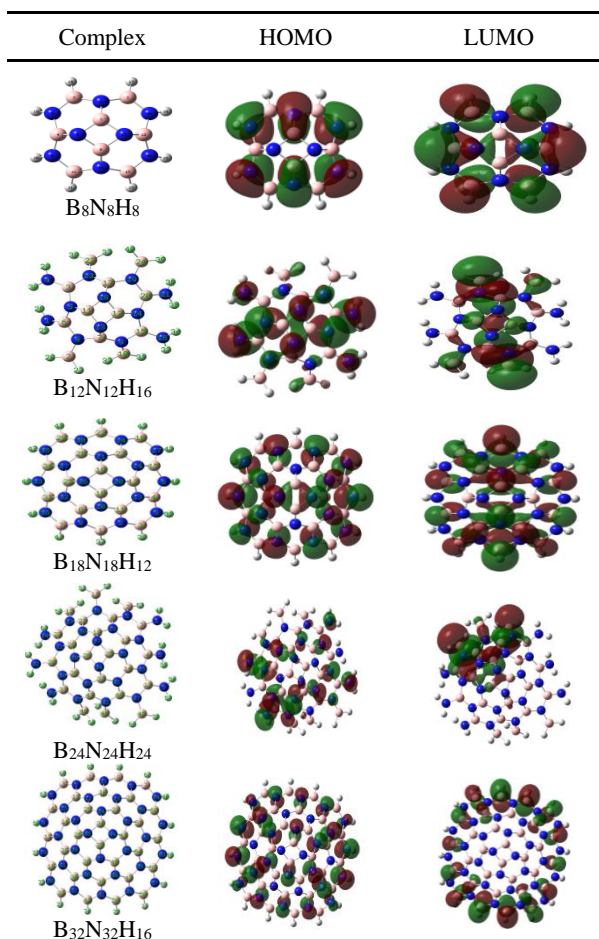
شبیه‌سازی محاسباتی برای نانومخروط‌های بورنیتريد در فاز گازی با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) نرم‌افزار گوسین ۰۹ (Frisch et al., 2010) و با روش B3LYP و مجموعه پایه cc-pvdz انجام شده است. B3LYP (سه پارامتر تابعی ترکیبی لی-یانگ-پار) یکی از دقیق‌ترین روش‌ها برای محاسبه انرژی معرفی شده است ([Becke, 1992](#); [Ignaczak & Gomes, 1996](#); [López & Illas, 1998](#)) نظریه تابعی چگالی و روش B3LYP به‌طور گسترده در محاسبات استفاده شده‌اند ([Arjmandi et al., 2018](#)); [Kalantarian, 2019](#)). محاسبات فرکانس نیز برای گونه‌های موردنظر در سطح محاسباتی مذکور انجام شد که تمامی ساختارها فرکانس مثبت را نشان دادند. این امر نشان‌دهنده داشتن حداقل انرژی روی سطح انرژی پتانسیل است. توصیفگرهای دانسیته الکترونی، مقادیر مرتبه پیوند و نمودارهای چگالی حالت‌ها^۲ با استفاده از نرم‌افزار MultiWfn به دست آمده‌اند ([Lu & Chen, 2012](#)).

۳- نتایج و بحث

ساختارهای بهینه شده نانومخروطهای بورنیتريد با ارتفاعهای مخروط ۱ تا ۵ آنگستروم برای زاویه رأس ۶۰ درجه، ۳ تا ۷ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۲۰ درجه، ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۸۰ درجه و ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۲۴۰ درجه و همچنین ساختارهای HOMO و LUMO با استفاده از DFT/B3LYP/cc-pvdz در شکل های ۱ تا ۴ نشان داده شده اند.

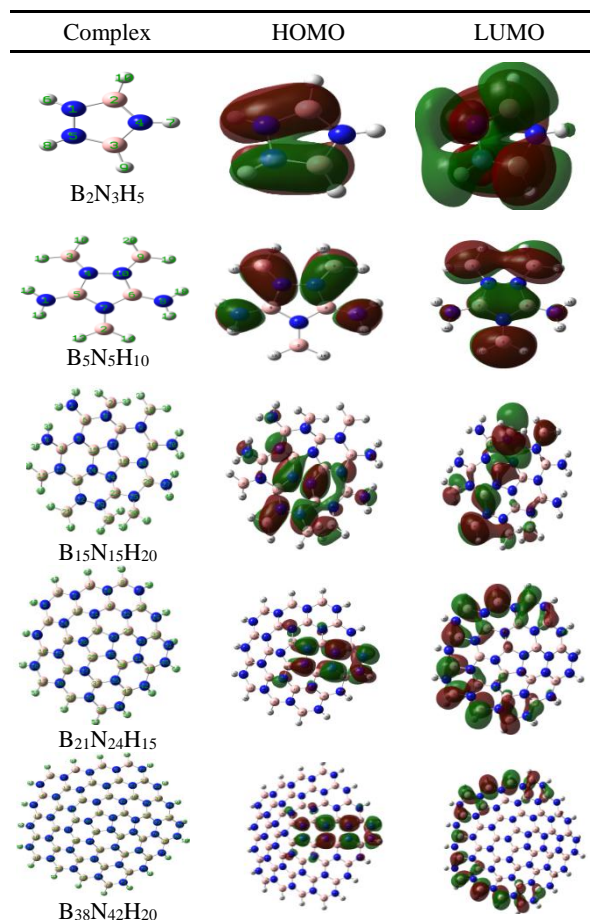
بررسی شکل ۱ نشان می دهد، در تمام ساختارهای نانومخروطهای بورنیتريد با ارتفاعهای مخروط ۱ تا ۵ آنگستروم برای زاویه رأس ۶۰ درجه، اوربیتال های HOMO بیشتر روی نیتروژن هایی متمرکز شده اند که با نیتروژن پیوند دارند (N-N). بنابراین، این سایت ها هسته دوست هستند. همچنین، در تمام ساختارها، اوربیتال های LUMO روی اتم های بور لایه آخر، که از دو اتم نیتروژن دارای پیوند فاصله گرفته اند، قرار دارند. بنابراین، این اتم های بور الکترون دوست هستند.

نحوه توزیع اوربیتال های HOMO و LUMO برای ساختارهای بهینه شده نانومخروطهای بورنیتريد با ارتفاعهای مخروط ۳ تا ۷ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۲۰ درجه، برای تمام ساختارها یکسان نیست (شکل ۲). برای سه ساختار اول، سایت های هسته دوست روی تمام نیتروژن ها (به جز دو نیتروژن در لایه اول) متمرکز شده اند. اما، در ساختار $B_{32}N_{32}H_{16}$ ، اوربیتال های HOMO روی اتم های نیتروژن به جز لایه اول و سوم متمرکز شده اند. اوربیتال های LUMO، برای سه ساختار اول، روی تمام بورها (به جز دو اتم بور در لایه اول) قرار دارند؛ یعنی این اتم ها تمایل به گرفتن الکترون دارند. اما، در ساختار $B_{32}N_{32}H_{16}$ ، اوربیتال های LUMO روی اتم های بور لایه آخر متمرکز شده اند که نشان می دهد اتم های بور سایت های فعال الکترون دوست هستند.




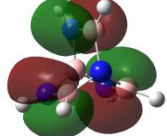
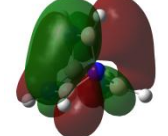

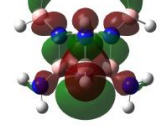
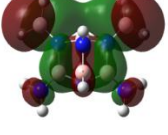

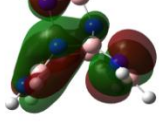


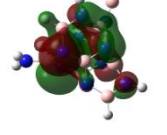
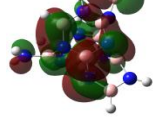
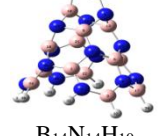
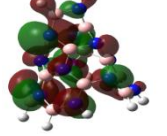

شکل ۲. ساختارهای بهینه شده نانومخروطهای بورنیتريد و ساختارهای HOMO و LUMO با ارتفاعهای مخروط ۳ تا ۷ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۲۰ درجه

مطابق شکل ۳، در تمام ساختارهای نانومخروطهای



شکل ۱. ساختارهای بهینه شده نانومخروطهای بورنیتريد و ساختارهای HOMO و LUMO با ارتفاعهای مخروط ۱ تا ۵ آنگستروم برای زاویه رأس ۶۰ درجه

آنگستروم برای زاویه رأس ۱۸۰ درجه

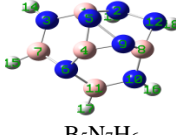
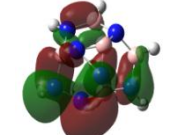
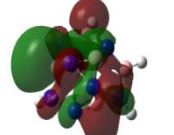
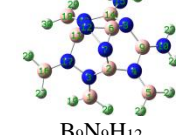
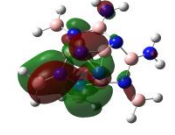
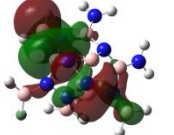
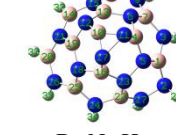
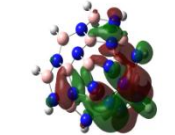
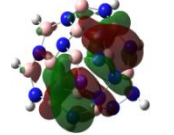
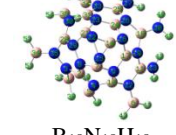
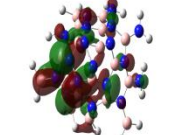
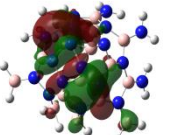
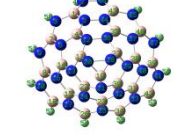
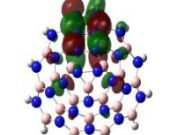
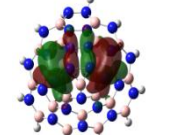
Complex	HOMO	LUMO
 B ₄ N ₄ H ₆		
 B ₆ N ₆ H ₁₀		
 B ₇ N ₇ H ₈		
 B ₁₀ N ₁₀ H ₁₀		
 B ₁₄ N ₁₄ H ₁₀		

شکل ۴. ساختارهای بهینه‌شده نانومخروط‌های بورنیتريد و ساختارهای HOMO و LUMO با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۲۴۰ درجه

۳-۱- متوسط طول و مرتبه پیوند

به‌منظور شناسایی پیوند بین اتم‌های کلیدی نانومخروط‌های بورنیتريد، متوسط طول و مرتبه پیوند بررسی شده است. تعاریفی از مرتبه پیوند وجود دارند که بیشتر آن‌ها خواص مکانیکی مولکول مانند MBO و FBO را مبنا قرار داده‌اند (Mayer, 1983; Mayer & Salvador, 2004). در جدول ۱، متوسط طول و مرتبه پیوندهای B-N و N-N مربوط به نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده است. جدول ۱ نشان می‌دهد که بی‌نظمی‌های کمی در افزایش یا کاهش متوسط طول و متوسط مرتبه پیوند، با زیاد شدن ارتفاع نانومخروط‌ها در هر نانومخروط با زاویه مشخص، وجود دارد. در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۶۰ درجه، با افزایش ارتفاع نانومخروط، متوسط طول پیوندها تقریباً افزایش و متوسط مرتبه پیوند نیز کاهش می‌یابد. برای مثال، در مولکول B₂N₃H₅، متوسط

بورنیتريد با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۸۰ درجه، اوربیتال‌های HOMO بیشتر روی نیتروژن‌هایی متمرکز شده‌اند که با نیتروژن پیوند دارند (N-N). بنابراین، این سایت‌ها هسته‌دوست هستند (مانند اوربیتال‌های HOMO با زاویه رأس ۶۰ درجه). اما نحوه توزیع اوربیتال‌های LUMO روی ساختارها یکسان نیست. با این حال، نحوه توزیع LUMO در اتم‌های بور تقریباً بیشتر از اتم‌های نیتروژن است. ساختارهای HOMO و LUMO با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۲۴۰ درجه در شکل ۴ نمایش داده شده‌اند. این شکل نشان می‌دهد که سایت‌های هسته‌دوست بیشتر روی اتم‌های نیتروژن این ساختارها و سایت‌های الکترون‌دوست بیشتر روی اتم‌های بور این ساختارها متمرکز شده‌اند. نتایج این بررسی‌ها با ساختار نیتروژن و بور مطابقت دارد. نیتروژن با داشتن جفت‌الکترون هسته‌دوست و بور با داشتن اوربیتال خالی هسته‌دوست است.

Complex	HOMO	LUMO
 B ₅ N ₇ H ₆		
 B ₉ N ₉ H ₁₂		
 B ₁₂ N ₁₅ H ₉		
 B ₁₈ N ₁₈ H ₁₈		
 B ₂₂ N ₂₆ H ₁₂		

شکل ۳. ساختارهای بهینه‌شده نانومخروط‌های بورنیتريد و ساختارهای HOMO و LUMO با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸

۱۸۰ درجه دیده می‌شود. همچنین، در این نانومخروط، کمترین مقدار متوسط طول پیوند B-N در مولکول B9N9H12 و بیشترین مقدار متوسط مرتبه پیوند (در هر دو روش) وجود دارد. در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۲۴۰ درجه، مولکول B4N4H6 بیشترین مقدار متوسط طول پیوند را دارد. با افزایش ارتفاع در این نانومخروط، متوسط طول پیوند بین اتم‌های بور و نیتروژن کاهش می‌یابد.

طول‌های پیوند B-N و N-N دارای کمترین مقدار و متوسط مرتبه پیوند آن‌ها دارای بیشترین مقدار در هر دو روش است. در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۱۲۰ درجه، B32N32H16 کمترین مقدار متوسط طول پیوند را دارد. کمترین مقدار متوسط طول پیوند N-N در مولکول B22N26H12 و همچنین بیشترین مقدار متوسط مرتبه پیوند (در هر دو روش) در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس

جدول ۱. متوسط طول و مرتبه پیوندهای B-N و N-N مربوط به نانومخروط‌های بورنیتريد

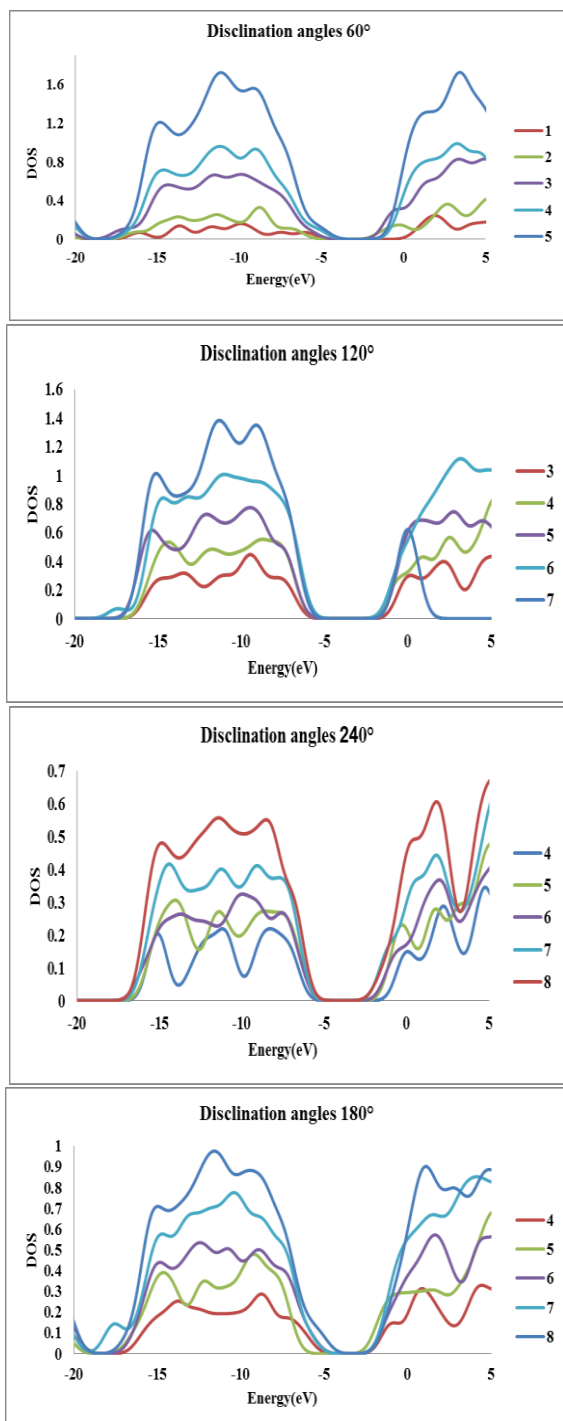
Disclination angle	Complex	B-N			N-N		
		Bond Length	Bond Order		Bond Length	Bond Order	
			MBO	FBO		MBO	FBO
60	B ₂ N ₃ H ₅	1.430	1.378	1.283	1.410	1.017	1.299
	B ₅ N ₅ H ₁₀	1.432	1.320	1.240	1.410	0.928	1.169
	B ₁₅ N ₁₅ H ₂₀	1.448	1.252	1.162	1.441	0.933	1.158
	B ₂₁ N ₂₄ H ₁₅	1.445	1.248	1.153	1.439	0.953	1.203
	B ₃₈ N ₄₂ H ₂₀	1.446	1.246	1.149	1.438	0.946	1.196
	B ₈ N ₈ H ₈	1.453	1.237	1.159	-	-	-
120	B ₁₂ N ₁₂ H ₁₆	1.454	1.239	1.157	-	-	-
	B ₁₈ N ₁₈ H ₁₂	1.452	0.952	1.140	-	-	-
	B ₂₄ N ₂₄ H ₂₄	1.454	1.229	1.139	-	-	-
	B ₃₂ N ₃₂ H ₁₆	1.449	1.228	1.136	-	-	-
	B ₅ N ₇ H ₆	1.454	1.248	1.149	1.561	0.853	1.099
	B ₉ N ₉ H ₁₂	1.447	1.247	1.164	1.558	0.829	1.054
180	B ₁₂ N ₁₅ H ₉	1.452	1.237	1.137	1.528	0.884	1.123
	B ₁₈ N ₁₈ H ₁₈	1.453	1.226	1.130	1.525	0.864	1.089
	B ₂₂ N ₂₆ H ₁₂	1.449	1.228	1.135	1.504	0.896	1.135
	B ₄ N ₄ H ₆	1.506	1.209	1.122	-	-	-
	B ₆ N ₆ H ₁₀	1.458	1.248	1.166	-	-	-
	B ₇ N ₇ H ₈	1.482	1.209	1.122	-	-	-
240	B ₁₀ N ₁₀ H ₁₀	1.465	1.207	1.119	-	-	-
	B ₁₄ N ₁₄ H ₁₀	1.462	1.213	1.121	-	-	-

با ارتفاع مخروط ۶ آنگستروم دارای گاف انرژی کمتر، سختی کمتر و در نتیجه واکنش‌پذیری بیشتری است. نانومخروط با ارتفاع مخروط ۴ آنگستروم دارای بیشترین الکترون‌گاتیوی است و در نتیجه تمایل بیشتری به گرفتن الکترون دارد. مخروط ۶ آنگستروم دارای گاف انرژی کمتر، سختی کمتر و در نتیجه واکنش‌پذیری بیشتری است. نانومخروط با ارتفاع مخروط ۴ آنگستروم دارای بیشترین الکترون‌گاتیوی است و در نتیجه تمایل بیشتری به گرفتن الکترون دارد. B22N26H12، به دلیل گاف انرژی کمتر و سختی کمتر، واکنش‌پذیری بیشتری بین نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۱۸۰ درجه دارد. اما B9N9H12 تمایل بیشتری به گرفتن الکترون دارد. در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۲۴۰ درجه و ارتفاع

۳-۲- پارامترهای کوانتومی

توصیفگرهای دانسیته الکترونی اعدادی هستند که اطلاعاتی در خصوص خصوصیات مولکولی می‌دهند و به محاسبه خواص توصیفگرهای مولکولی نانومخروط‌های بورنیتريد با ارتفاع‌های مخروط و زاویه‌های رأس گوناگون با توجه به ساختارهای بهینه شده آن‌ها کمک می‌کنند. این توصیفگرها در جدول ۲ نشان داده شده‌اند. براساس جدول ۲، در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۶۰ درجه، B38N42H20 گاف انرژی کمتر، سختی کمتر و در نتیجه واکنش‌پذیری بیشتری دارد. اما الکترون‌گاتیوی و تمایل به گرفتن الکترون در B5N5H10 بیشتر از بقیه نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۶۰ درجه است. در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۱۲۰ درجه، نانومخروط

این شکل‌ها نشان می‌دهند که تطابق مطلوبی بین محدوده گاف انرژی و نتایج حاصل از HOMO و LUMO وجود دارد؛ زیرا محدوده‌ای که انرژی چگالی حالت‌هایش در نمودار صفر است دارای گاف انرژی است و در بازه انرژی‌های HOMO و LUMO قرار دارد.



شکل ۵. DOS نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده

۳-۴- قطبش پذیری

برای مشخص کردن خواص نوری غیرخطی ترکیبات

مخروط ۸ آنگستروم، واکنش‌پذیری بیشتر (گاف انرژی کمتر و سختی کمتر) و همچنین تمایل بیشتری به گرفتن الکترون وجود دارد. در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۲۴۰ درجه، با افزایش ارتفاع مخروط، واکنش‌پذیری و الکترون‌گاتیوی افزایش می‌یابد.

جدول ۲. توصیف‌گرهای کوانتومی BNNCs

Disclination angle	Complex	E_g (eV)	η (eV)	χ (eV)
60	B ₂ N ₃ H ₅	6.969	3.484	2.461
	B ₅ N ₅ H ₁₀	5.332	2.666	3.851
	B ₁₅ N ₁₅ H ₂₀	4.891	2.446	3.283
	B ₂₁ N ₂₄ H ₁₅	4.927	2.463	2.664
	B ₃₈ N ₄₂ H ₂₀	4.683	2.341	2.604
120	B ₈ N ₈ H ₈	6.730	3.365	3.613
	B ₁₂ N ₁₂ H ₁₆	6.017	3.008	3.893
	B ₁₈ N ₁₈ H ₁₂	6.232	3.116	3.727
	B ₂₄ N ₂₄ H ₂₄	5.792	2.896	3.688
	B ₃₂ N ₃₂ H ₁₆	6.320	3.160	3.557
180	B ₅ N ₇ H ₆	5.145	2.573	3.617
	B ₉ N ₉ H ₁₂	5.610	2.805	4.404
	B ₁₂ N ₁₅ H ₉	4.755	2.377	3.515
	B ₁₈ N ₁₈ H ₁₈	4.733	2.366	3.551
	B ₂₂ N ₂₆ H ₁₂	4.157	2.079	3.161
240	B ₄ N ₄ H ₆	6.888	3.444	3.493
	B ₆ N ₆ H ₁₀	5.978	2.989	3.680
	B ₇ N ₇ H ₈	5.672	2.836	3.759
	B ₁₀ N ₁₀ H ₁₀	5.471	2.735	4.012
	B ₁₄ N ₁₄ H ₁₀	5.265	2.633	4.023

۳-۳- چگالی حالت‌ها

چگالی حالت‌ها به تعداد حالت‌های الکترونی در یک نوار الکترونی (رسانش - ظرفیت) گفته می‌شود که بیانگر حالت‌هایی است که انرژی آن‌ها بین E و E+dE است. به عبارتی، تعداد حالات در دسترس در واحد انرژی «چگالی حالت‌ها» نام دارد. براساس شکل ۵، با افزایش ارتفاع مخروط در نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده، مقدار چگالی حالت‌ها افزایش می‌یابد. بنابراین، تعداد حالت‌های اشغال الکترون نانومخروط‌های بورنیتريد با افزایش ارتفاع مخروط‌ها تغییر می‌کند که نشان‌دهنده تغییرات ساختارها با افزایش ارتفاع و تغییر زاویه رأس است. مقایسه این شکل‌ها با نتایج حاصل از گاف انرژی نشان می‌دهد که تطابق مطلوبی بین این دو نتیجه وجود دارد؛ زیرا اختلاف بین کمترین و بیشترین گاف انرژی در ۶۰، ۱۲۰، ۱۸۰ و ۲۴۰ درجه به ترتیب برابر با ۲/۲۸۶، ۱/۹۳۸، ۱/۴۵۳ و ۱/۶۲۳ آنگستروم است و این اختلاف در نمودار چگالی حالت‌ها نیز مشاهده می‌شود.

نتایج توصیفگرهای کوانتومی مطابقت دارد.

جدول ۳. ممان دوقطبی و قطبش‌پذیری نانومخروط‌های بورنیتريد

Disclination Angle	Complex	$\mu_{tot}(D)$	$\alpha_{tot} \cdot 10^{-23}$ (esu)	$\Delta\alpha \cdot 10^{-23}$ (esu)
60	B ₂ N ₃ H ₅	1.360	0.639	0.384
	B ₅ N ₅ H ₁₀	1.915	1.467	1.031
	B ₁₅ N ₁₅ H ₂₀	3.064	4.186	2.614
	B ₂₁ N ₂₄ H ₁₅	5.107	5.661	3.674
	B ₃₈ N ₄₂ H ₂₀	7.031	10.306	6.833
120	B ₈ N ₈ H ₈	2.611	1.934	0.813
	B ₁₂ N ₁₂ H ₁₆	1.829	3.186	1.516
	B ₁₈ N ₁₈ H ₁₂	4.069	4.344	1.677
	B ₂₄ N ₂₄ H ₂₄	4.359	6.223	2.379
	B ₃₂ N ₃₂ H ₁₆	5.352	7.874	3.002
180	B ₅ N ₇ H ₆	4.664	1.361	0.315
	B ₉ N ₉ H ₁₂	6.478	2.420	0.841
	B ₁₂ N ₁₅ H ₉	5.503	3.043	0.447
	B ₁₈ N ₁₈ H ₁₈	8.651	4.566	0.848
	B ₂₂ N ₂₆ H ₁₂	8.747	5.520	0.461
240	B ₄ N ₄ H ₆	2.960	0.987	0.109
	B ₆ N ₆ H ₁₀	2.607	1.632	0.439
	B ₇ N ₇ H ₈	1.462	1.722	0.250
	B ₁₀ N ₁₀ H ₁₀	1.311	2.448	0.662
	B ₁₄ N ₁₄ H ₁₀	4.557	3.252	0.689

۵-۳- بار الکتریکی

محاسبات بار الکتریکی اتمی، به‌عنوان بار اتم‌ها، در ممان دوقطبی، قطبش‌پذیری مولکولی، ساختار الکترونی و بسیاری از خواص مربوط به سیستم‌های مولکولی تأثیرگذار هستند. محاسبات بارهای جزئی اتمی برای تمام ساختارها با دو روش هرشفیلد^۲ و ADCH^۳ (Lu & Chen, 2012a) انجام شده‌اند. در شکل ۶، بارهای اتمی بور و نیتروژن برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۱ تا ۵ آنگستروم برای زاویه رأس ۶۰ درجه توسط دو روش هرشفیلد و ADCH نمایش داده شده‌اند.

همان‌طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، در تمام نانومخروط‌های بورنیتريد و در هر دو روش، نیتروژن دارای بار منفی و بور دارای بار مثبت است. برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۱ آنگستروم برای زاویه

مورد مطالعه، مقادیر قطبش‌پذیری (α) و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی^۱ ($\Delta\alpha$) و ممان دوقطبی (μ) محاسبه شده‌اند. بر این اساس، ممان دوقطبی کل در سه جهت در رابطه (۱)، قطبش‌پذیری در رابطه (۲) و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی در رابطه (۳) محاسبه شده‌اند. نتایج این محاسبات در جدول ۳ جمع‌آوری شده است.

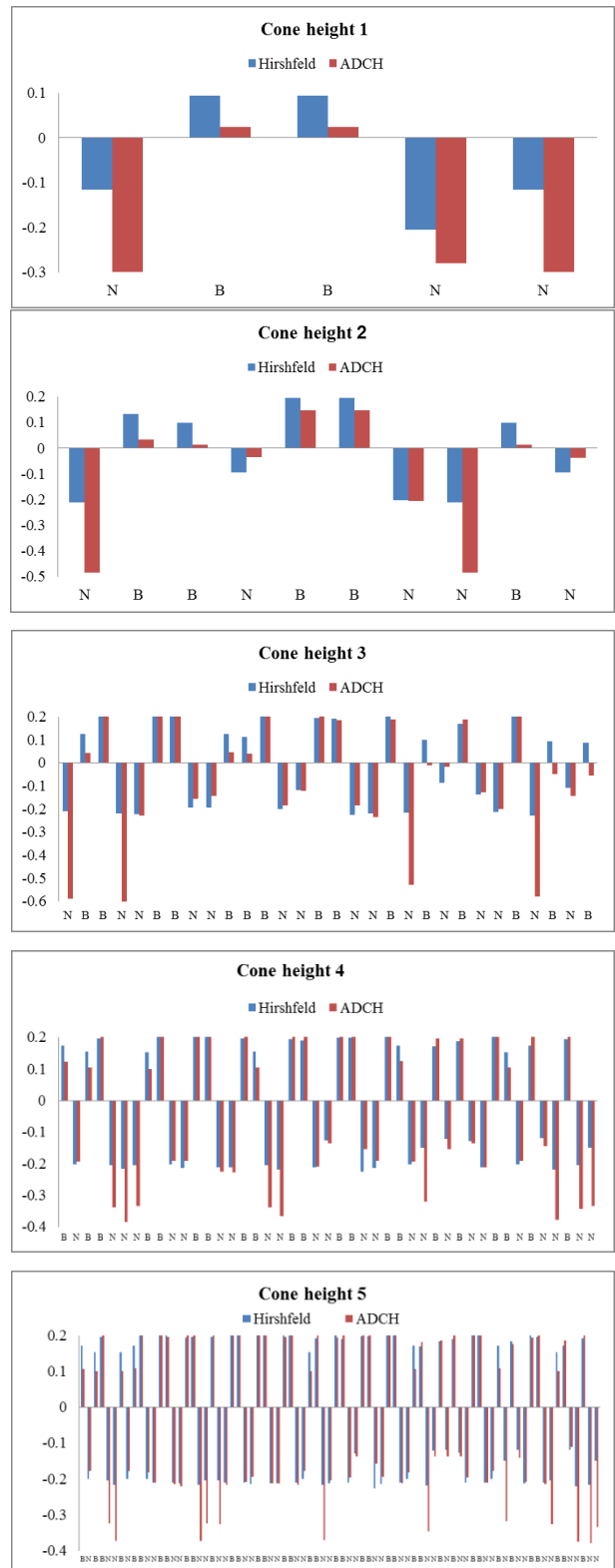
$$\mu_{tot} = (\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{معادله ۱})$$

$$\alpha_{tot} = \frac{1}{3}(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}) \quad (\text{معادله ۲})$$

$$\Delta\alpha = ((\frac{1}{2}(\alpha_{xx} - \alpha_{yy}))^2 + (\alpha_{xx} - \alpha_{zz})^2 + (\alpha_{yy} - \alpha_{zz})^2 + 6(\alpha_{xy}^2 + \alpha_{xz}^2 + \alpha_{yz}^2)) \quad (\text{معادله ۳})$$

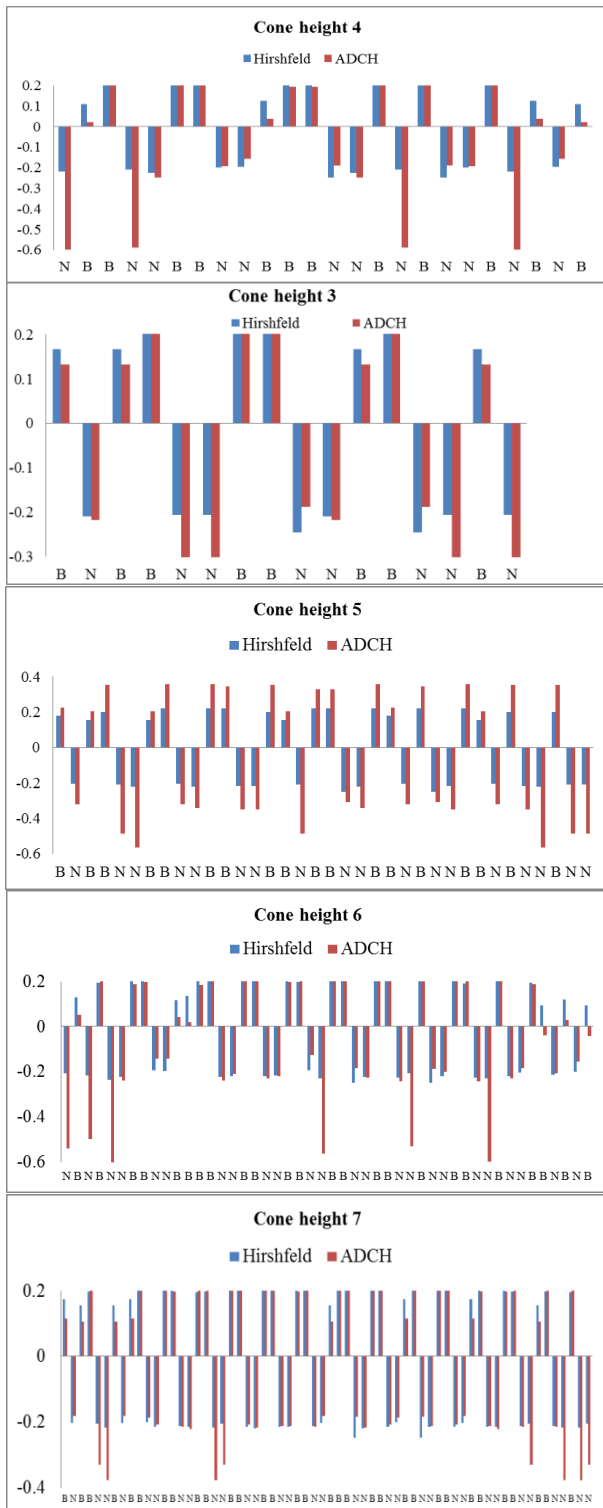
مطابق جدول ۳، در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۶۰ درجه، ممان دوقطبی و قطبش‌پذیری و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی با افزایش ارتفاع نانومخروط افزایش می‌یابند. مولکول B₃₈N₄₂H₂₀ دارای بیشترین ممان دوقطبی، قطبش‌پذیری و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی است؛ یعنی این مولکول، در مقایسه با بقیه مولکول‌های دارای زاویه رأس ۶۰ درجه، نرمی و واکنش‌پذیری بیشتری دارد. این نتایج با نتایج توصیفگرهای کوانتومی مطابقت دارند. در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۱۲۰ درجه، نانومخروط B₃₂N₃₂H₁₆ دارای بیشترین ممان دوقطبی، قطبش‌پذیری و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی است. در این نانومخروط‌ها، قطبش‌پذیری و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی با افزایش ارتفاع نانومخروط افزایش می‌یابد، اما این تغییرات در ممان دوقطبی بی‌نظمی کمی دارد. نانومخروط B₂₂N₂₆H₁₂، به‌دلیل ممان دوقطبی، قطبش‌پذیری و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی بالاتر، واکنش‌پذیری بیشتری از نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۱۸۰ درجه دارد. این نتایج با نتایج توصیفگرهای کوانتومی مطابقت دارند. در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۲۴۰ درجه، نانومخروط B₁₄N₁₄H₁₀ دارای نرمی بیشتری (ممان دوقطبی، قطبش‌پذیری و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی بالاتر) است که با

است و بیشترین بار مثبت مربوط به اتم‌های بور با مقادیر ۰/۰۹۴ و ۰/۰۲۴ به ترتیب براساس روش‌های هرشفیلد و ADCH است. نیتروژن‌های شماره ۱ و ۸ (دو نیتروژن در حلقه دوم) دارای بیشترین مقدار بار منفی ۰/۲۱۲ و ۰/۴۸۴ و دو اتم بور با شماره‌های ۵ و ۶ (در حلقه اول) با ۰/۱۹۵ و ۰/۱۴۷ دارای بیشترین مقدار بار مثبت به ترتیب براساس روش‌های هرشفیلد و ADCH در نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۲ آنگستروم هستند. در نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۳ آنگستروم، بیشترین مقدار بار مثبت (۰/۲۴۲) مربوط به B26 (در حلقه سوم وصل به سه اتم نیتروژن) و سپس بیشترین مقدار بار مثبت (۰/۲۲۴) مربوط به بور B15 (در حلقه اول وصل به سه اتم N) با روش ADCH و در نهایت بیشترین مقادیر بار مثبت (۰/۲۳۳ و ۰/۲۲۱) مربوط به B7 و B12 (اتم‌های بور در حلقه دوم وصل به سه اتم N) با روش هرشفیلد است. از طرفی، بیشترین مقادیر بار منفی ۰/۶۱۶، ۰/۵۹۰، ۰/۵۸۰ و ۰/۵۲۹ به ترتیب مربوط به اتم‌های N1، N4، N27 و N20 (نیتروژن‌های حلقه آخر) در روش ADCH و مربوط به N27 (نیتروژن حلقه آخر)، N17 (نیتروژن وصل به سه اتم بور در حلقه اول)، N5 و N18 (نیتروژن‌های وصل به سه اتم بور در حلقه دوم) به ترتیب با مقادیر ۰/۲۲۸، ۰/۲۲۷، ۰/۲۲۲ و ۰/۲۲۰ در روش هرشفیلد هستند. در نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۴ آنگستروم، اتم‌های نیتروژن آخرین حلقه دارای بیشترین مقادیر بار منفی ۰/۳۸۵، ۰/۳۷۸، ۰/۳۶۶، ۰/۳۴۲، ۰/۳۳۹، ۰/۳۳۸، ۰/۳۳۴، ۰/۳۳۳ و ۰/۳۲۰ به ترتیب مربوط به N6، N42، N19، N44، N5، N18، N45 (اتم‌های نیتروژن متصل به دو اتم بور) و N7 و N31 (اتم‌های نیتروژن متصل به یک اتم بور) در روش ADCH و همچنین مربوط به اتم نیتروژن در حلقه اول (متصل به سه اتم بور) (N26) با مقدار ۰/۲۲۶ و سپس N42 و N19 با مقادیر ۰/۲۱۹ و ۰/۲۱۸ در روش هرشفیلد هستند. بیشترین مقادیر بار مثبت در هر دو روش مربوط به اتم‌های بور است که روی حلقه سوم قرار دارند (هر بور به سه اتم نیتروژن وصل است) که اتم‌های B12، B28، B37 و B9 به ترتیب دارای مقادیر ۰/۲۳۵، ۰/۲۳۵، ۰/۲۲۵ و ۰/۲۲۳ در روش ADCH و دارای مقادیر ۰/۲۱۷، ۰/۲۱۷، ۰/۲۱۴ و ۰/۲۱۴ در روش هرشفیلد هستند. در نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط



شکل ۶. نمودار بارهای اتمی بور و نیتروژن برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۱ تا ۵ آنگستروم برای زاویه رأس ۶۰ درجه در روش هرشفیلد و ADCH

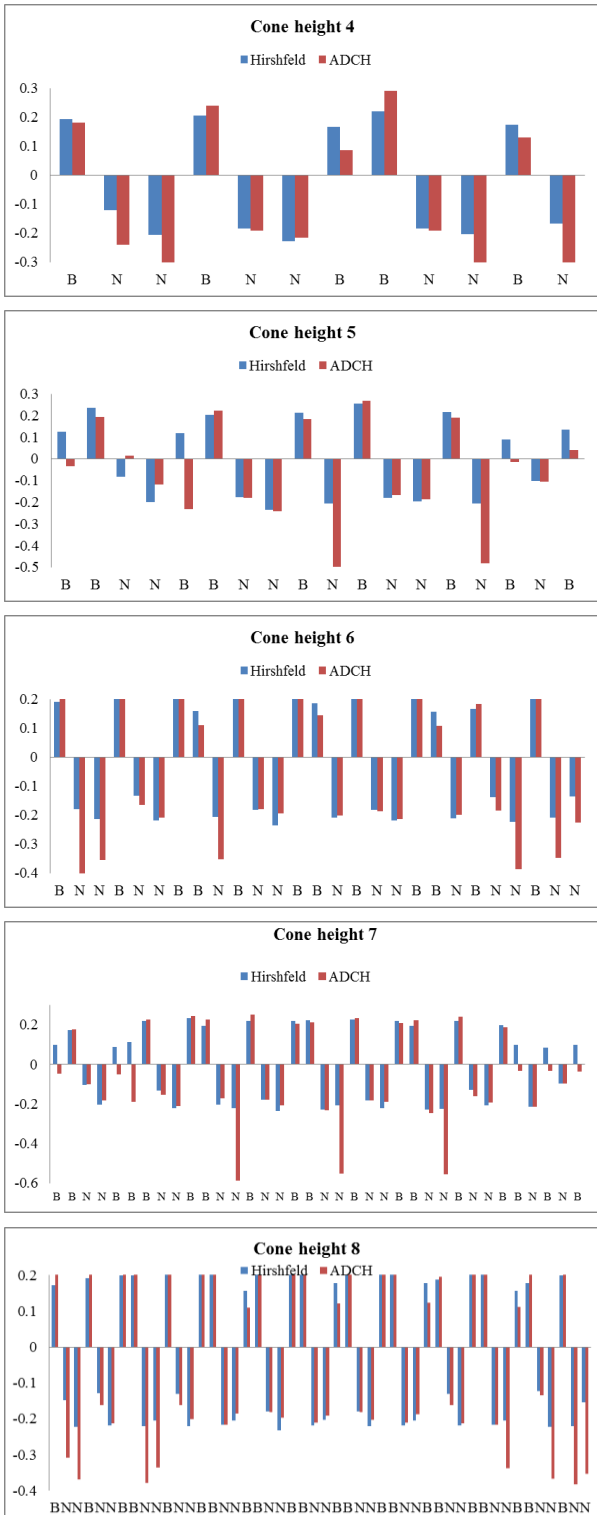
رأس ۶۰ درجه، بیشترین مقدار بار منفی مربوط به نیتروژن شماره ۴ (نیتروژن بین دو اتم بور) با مقادیر ۰/۲۰۵ و ۰/۲۷۹



شکل ۷. نمودار بارهای اتمی بور و نیتروژن برای نانومخروطهای بورنیتريد بهینه شده با ارتفاع های مخروط ۳ تا ۷ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۲۰ درجه در دو روش هرشفیلد و ADCH

اتم های بور روی حلقه دوم (B7 و B17) با مقدار ۰/۲۳۷ و ۰/۲۴۳ به ترتیب با روش های ADCH و هرشفیلد دارای بیشترین مقدار بار مثبت هستند. برای نانومخروط های بورنیتريد بهینه شده با ارتفاع مخروط ۵ آنگستروم، بیشترین مقدار بار منفی

۵ آنگستروم، بیشترین بار منفی مربوط به اتم های نیتروژن حلقه آخر با شماره های ۷۹، ۷۷، ۱۹ و ۳۸ به ترتیب با مقادیر ۰/۳۷۹، ۰/۳۷۵، ۰/۳۷۳ و ۰/۳۷۱ در روش ADCH است و همچنین بیشترین بار منفی مربوط به N46 (نیتروژن در حلقه اول)، N77، N54، N38، N79، N6 و N19 (نیتروژن های موجود در حلقه آخر) به ترتیب با مقادیر ۰/۲۲۶، ۰/۲۲۰، ۰/۲۱۹، ۰/۲۱۸، ۰/۲۱۸، ۰/۲۱۷ و ۰/۲۱۷ در روش هرشفیلد است. در هر دو روش، بیشترین بار مثبت مربوط به اتم های بور روی حلقه سوم (وصل به سه اتم نیتروژن) است. به عبارتی، B48 و B28 دارای مقدار یکسان ۰/۲۲۹ در روش ADCH و مقدار یکسان ۰/۲۱۷ در روش هرشفیلد هستند. در شکل ۷، بارهای اتمی بور و نیتروژن برای نانومخروط های بورنیتريد بهینه شده با ارتفاع های مخروط ۳ تا ۷ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۲۰ درجه در دو روش هرشفیلد و ADCH نمایش داده شده اند. همان طور که شکل ۷ نشان می دهد، در تمام نانومخروط های بورنیتريد، نیتروژن دارای بار منفی و بور دارای بار مثبت در هر دو روش است. برای نانومخروط های بورنیتريد بهینه شده با ارتفاع مخروط ۳ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۲۰ درجه، نیتروژن های روی حلقه آخر (حلقه سوم) با مقدار یکسان ۰/۳۶۲ (N16، N14، N6، N5) در روش ADCH و دو اتم نیتروژن در حلقه اول (وصل به سه اتم بور) با مقدار یکسان ۰/۲۴۶ در روش هرشفیلد دارای بیشترین بار منفی هستند و اتم های بور با شماره های ۴ و ۱۲ (در حلقه دوم، وصل به سه اتم نیتروژن) با مقدار یکسان ۰/۲۳۶ و همچنین B8 و B7 (اتم های بور در حلقه اول، وصل به سه اتم نیتروژن) با مقدار یکسان ۰/۲۱۱ در روش ADCH و با مقدار یکسان ۰/۲۱۴ در روش هرشفیلد بیشترین بار مثبت را دارند. برای نانومخروط های بورنیتريد بهینه شده با ارتفاع مخروط ۴ آنگستروم، اتم های نیتروژن روی حلقه آخر، N1 و N21 (با مقدار یکسان ۰/۶۰۰) و N4 و N16 (با مقدار یکسان ۰/۵۸۹) در روش ADCH و نیتروژن های حلقه اول (با مقدار یکسان ۰/۲۴۹) و نیتروژن های حلقه دوم (با مقدار یکسان ۰/۲۲۶) در روش هرشفیلد دارای بیشترین مقدار بار منفی هستند.

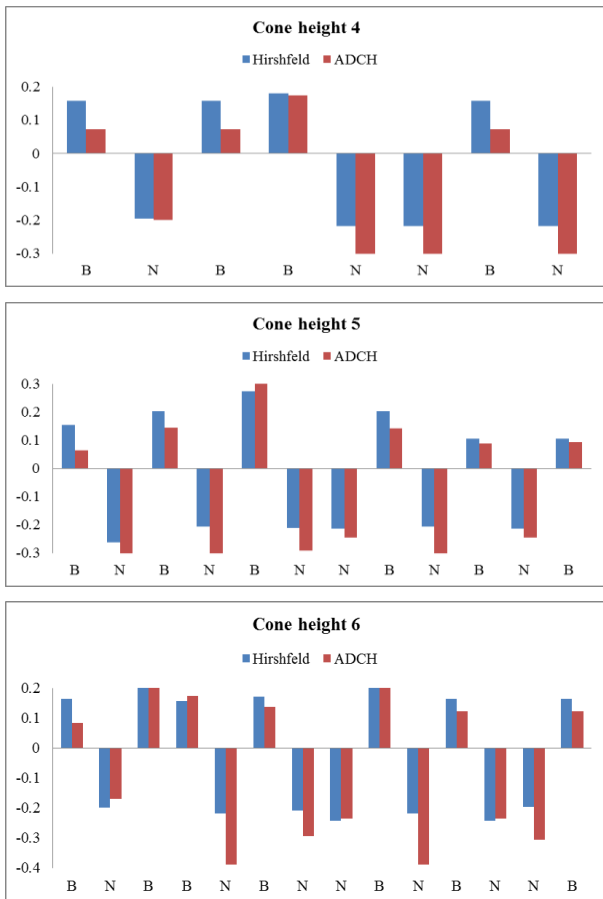


شکل ۸. نمودار بارهای اتمی بور و نیتروژن برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهينه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۸۰ درجه در دو روش هرشفیلد و ADCH

همان‌طور که شکل ۸ نشان می‌دهد، در تمام نانومخروط‌های بورنیتريد، در هر دو روش، نیتروژن دارای بار منفی و بور دارای بار مثبت است. برای نانومخروط‌های

مربوط به نیتروژن‌های حلقه آخر (مخصوصاً N33 و N6 با مقدار ۰/۵۶۵) در روش ADCH و نیتروژن‌های حلقه اول (با مقدار ۰/۲۵۰) و سپس نیتروژن‌های حلقه آخر در روش هرشفیلد محاسبه شده است. بیشترین مقدار بار مثبت در روش ADCH مربوط به چهار اتم بور روی حلقه سوم با مقدار یکسان ۰/۳۵۸ و سپس مربوط به چهار اتم بور روی حلقه چهارم با مقدار یکسان ۰/۳۵۳ است. بیشترین بار مثبت در روش هرشفیلد مربوط به دو اتم بور در حلقه اول با مقدار یکسان ۰/۲۲۳ و سپس مربوط به چهار اتم بور روی حلقه سوم با مقدار یکسان ۰/۲۲۱ است. برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهينه‌شده با ارتفاع مخروط ۶ آنگستروم، نیتروژن‌های حلقه آخر با مقادیر (N1) ۰/۵۴۰، (N24) ۰/۵۶۴، (N39) ۰/۵۹۹، (N5) ۰/۶۰۴ و (N32) ۰/۵۳۲ در روش ADCH و دو اتم نیتروژن در حلقه اول با مقدار یکسان ۰/۲۴۸ و سپس نیتروژن‌های حلقه آخر با مقادیر (N5) ۰/۲۳۷، (N39) ۰/۲۳۱، (N3) ۰/۲۳۰، (N24) ۰/۲۳۰، (N1) ۰/۲۲۵، (N32) ۰/۲۲۵ و (N3) ۰/۲۲۵ در روش هرشفیلد دارای بیشترین مقدار بار منفی هستند. اتم‌های بور با مقادیر (B21) ۰/۲۳۳ و (B8) ۰/۲۳۱ در حلقه چهارم در روش هرشفیلد و اتم‌های بور با مقادیر (B4) ۰/۲۵۵ و (B37) ۰/۲۲۹ در حلقه چهارم در روش ADCH بیشترین مقادیر بار مثبت را دارند. برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهينه‌شده با ارتفاع مخروط ۷ آنگستروم، بیشترین مقدار بار منفی مربوط به نیتروژن‌های حلقه آخر (مخصوصاً N63 و N61 با مقدار یکسان ۰/۳۷۶ و همچنین N6 و N19 با مقدار یکسان ۰/۳۷۶) در روش ADCH و دو اتم نیتروژن در حلقه اول با مقادیر یکسان ۰/۲۴۷ و سپس دو اتم نیتروژن در حلقه دوم با مقادیر یکسان ۰/۲۱۹ و آن‌گاه اتم‌های نیتروژن در حلقه آخر در بازه ۰/۲۱۷ تا ۰/۲۱۵ در روش هرشفیلد است. چهار اتم بور در حلقه سوم با مقدار یکسان ۰/۲۲۷ در روش ADCH و دو اتم بور در حلقه دوم با مقدار یکسان ۰/۲۲۳ و سپس چهار اتم بور در حلقه سوم با مقدار یکسان ۰/۲۲۲ در روش هرشفیلد بیشترین مقدار بار مثبت را دارند. در شکل ۸، بارهای اتمی بور و نیتروژن برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهينه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۸۰ درجه در دو روش هرشفیلد و ADCH نمایش داده شده است.

بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۸ آنگستروم، نیتروژن‌های حلقه آخر در بازه ۰/۳۸۳ (N47) و ۰/۳۰۹ (N8) در روش ADCH و نیتروژن‌های N21 (۰/۲۳۳)، N47 (۰/۲۲۳) و N3 (۰/۲۲۲) در روش هرشفیلد بیشترین مقادیر بار منفی را دارند. بیشترین مقادیر بار مثبت مربوط به اتم بور در حلقه اول (۰/۲۵۱) و اتم‌های بور در حلقه دوم B27 (۰/۲۲۹) و B11 (۰/۲۲۷) در روش ADCH و اتم‌های بور حلقه سوم با مقدار یکسان ۰/۲۳۱ و اتم‌های بور حلقه دوم با مقادیر یکسان ۰/۲۲۴ در روش هرشفیلد است. در شکل ۹، بارهای اتمی بور و نیتروژن برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۲۴۰ درجه در دو روش هرشفیلد و ADCH نمایش داده شده است.



شکل ۹. نمودار بارهای اتمی بور و نیتروژن برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۲۴۰ درجه در دو روش هرشفیلد و ADCH

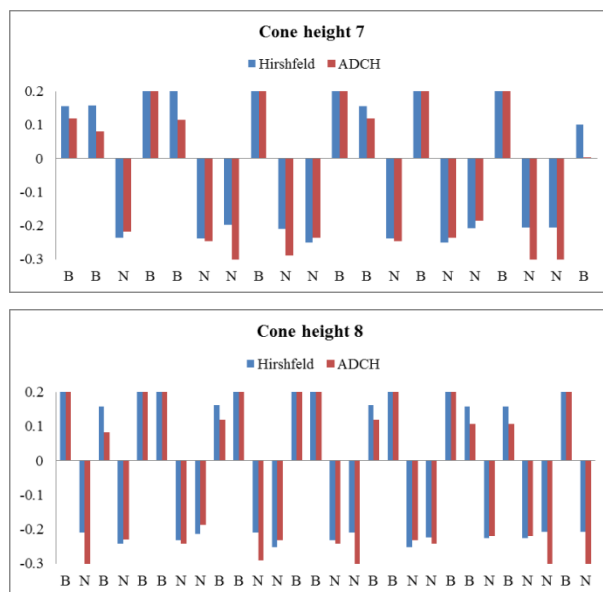
بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۴ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۸۰ درجه، نیتروژن‌های حلقه آخر با شماره‌های ۱۲ (۰/۴۱۹)، ۱۰ (۰/۳۲۲) و ۳ (۰/۳۱۲) در روش ADCH و نیتروژن N6 (۰/۲۲۹) در حلقه دوم و سپس نیتروژن‌های حلقه آخر N10 و N3 (۰/۲۰۵ و ۰/۲۰۶) در روش هرشفیلد دارای بیشترین بار منفی هستند. محاسبات نشان می‌دهد که B4 و B8 با مقادیر ۰/۲۳۹ و ۰/۲۲۱ در روش ADCH و ۰/۲۰۶ و ۰/۲۰۶ در روش هرشفیلد دارای بیشترین مقادیر بار مثبت هستند. برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۵ آنگستروم، دو نیتروژن حلقه آخر N10 و N15 با مقادیر ۰/۴۹۸ و ۰/۴۸۲ در روش ADCH و همچنین N8 با مقدار ۰/۲۳۵ و دو نیتروژن حلقه آخر N10 و N15 با مقادیر ۰/۲۰۷ و ۰/۲۰۶ در روش هرشفیلد دارای بیشترین مقادیر بار منفی هستند. اتم‌های بور در حلقه دوم (B2 و B11) با مقادیر ۰/۲۵۵ و ۰/۲۳۵ در روش هرشفیلد و اتم‌های بور B6، B11 (بور در حلقه اول) و B2 به ترتیب با مقادیر ۰/۲۶۷، ۰/۲۲۲ و ۰/۱۹۲ در روش ADCH بیشترین بار مثبت را دارند. برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۶ آنگستروم، اتم بور در حلقه اول (B10)، B1 و B16 به ترتیب با مقادیر ۰/۲۳۷، ۰/۲۵۶ و ۰/۲۳۶ در روش ADCH و دو اتم بور در حلقه سوم (B13 و B19) با مقادیر ۰/۲۲۹ و ۰/۲۲۸ و ۰/۲۲۳ (B16) در روش هرشفیلد دارای بیشترین مقادیر بار مثبت هستند. بیشترین مقادیر بار منفی در روش ADCH مربوط به نیتروژن‌های حلقه آخر (مخصوصاً N2 با مقدار ۰/۴۲۱ و N24 با مقدار ۰/۳۸۶) و در روش هرشفیلد مربوط به N12 (۰/۲۳۶) و سپس نیتروژن‌های حلقه آخر (مخصوصاً N24 با مقدار ۰/۲۲۵) بوده است. برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۷ آنگستروم، نیتروژن‌های حلقه آخر (مخصوصاً N13، N27 و N20 با مقادیر ۰/۵۵۷، ۰/۵۵۲ و ۰/۵۵۹) در روش ADCH و اتم‌های نیتروژن N16 (۰/۲۳۸)، N26 (۰/۲۳۰)، N19 (۰/۲۳۰) و N27 (۰/۲۲۶) در روش هرشفیلد دارای بیشترین مقادیر بار منفی هستند. همچنین، بیشترین مقادیر بار مثبت مربوط به اتم بور (B14) با مقدار ۰/۲۵۱ و B10 (۰/۲۴۲)، B28 (۰/۲۴۲) و B21 (۰/۲۳۲) در روش ADCH و اتم‌های B10 (۰/۲۴۲) و B21 (۰/۲۲۶)، B18 (۰/۲۲۲) و B17 (۰/۲۲۱) در روش هرشفیلد بوده است. برای نانومخروط‌های بورنیتريد

بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۷ آنگستروم، بیشترین مقادیر بار مثبت مربوط به اتم‌های بور با شماره‌های ۱۴ (۰/۲۵۱)، ۱۷ (۰/۲۵۱) و ۸ (۰/۲۴۲) در روش ADCH و اتم‌های B8 (۰/۲۴۶)، B14، N18، N19 (۰/۲۳۳) و B17 (۰/۲۳۳) در روش هرشفیلد است. و N7 و به ترتیب با مقادیر ۰/۳۴۲، ۰/۳۴۲ و ۰/۳۲۸ در روش ADCH و اتم‌های N10 و N15 با مقدار ۰/۲۵۰ و همچنین N13 و N6 با مقدار ۰/۲۳۹ و N3 با مقدار ۰/۲۳۷ دارای بیشترین مقادیر بار منفی در روش هرشفیلد هستند. برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۸ آنگستروم، بیشترین مقادیر بار منفی مربوط به اتم‌های نیتروژن ۲۶ و ۲۸ با مقدار یکسان ۰/۳۴۶ و سپس اتم‌های نیتروژن ۱۶ و ۲ با مقدار یکسان ۰/۳۴۰ در روش ADCH و برای اتم‌های N12 و N19 با مقدار یکسان ۰/۲۵۳ و همچنین N4 با مقدار ۰/۲۴۳ و N7 و N15 با مقدار یکسان ۰/۲۳۳ در روش هرشفیلد است. علاوه بر این، بیشترین مقادیر بار مثبت در این نانومخروط مربوط به اتم‌های بور با شماره‌های ۱۰ (۰/۲۶۲)، ۶ (۰/۲۳۹) و ۲۱، ۱۸، ۲۷ (با مقدار یکسان ۰/۲۳۸) در روش ADCH و اتم‌های B10 (۰/۲۵۳)، B6 (۰/۲۳۱) و B5 و B13 (با مقدار یکسان ۰/۲۲۹) در روش هرشفیلد است.

۶-۳- طیف IR

با روش‌های طیف‌بینی می‌توان ساختارهای مولکولی (صورت‌بندی‌ها، طول‌ها و زاویه‌های پیوندی) و فرکانس‌های ارتعاشی مولکولی را بررسی کرد. بیشتر اطلاعات تجربی درباره ترازهای انرژی اتم‌ها و مولکول‌ها از طیف‌بینی به دست می‌آیند. مبنای طیف‌سنجی IR بر حرکت ارتعاشی یا نوسانی مولکول‌ها استوار است. در شکل ۱۰، طیف IR برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۱ تا ۵ آنگستروم برای زاویه رأس ۶۰ درجه نمایش داده شده است.

بیشترین فرکانس ارتعاشی در نانومخروط با زاویه ۶۰ درجه و ارتفاع ۱ آنگستروم مربوط به فرکانس کششی پیوند N4-H7 (3669cm^{-1}) با شدت 33 km/mol است.



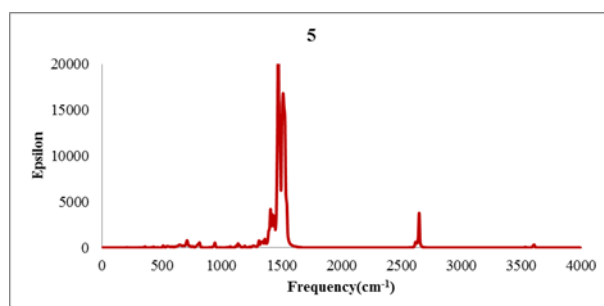
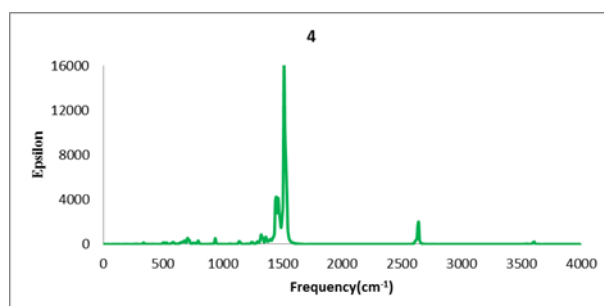
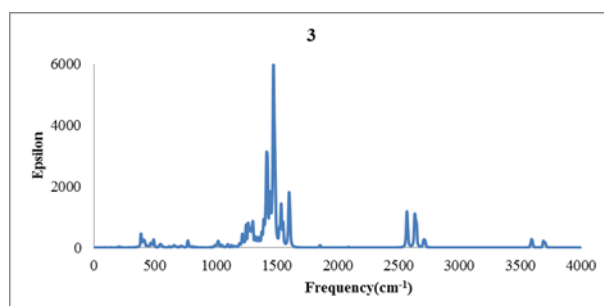
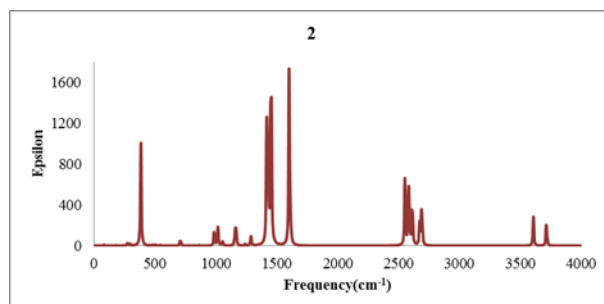
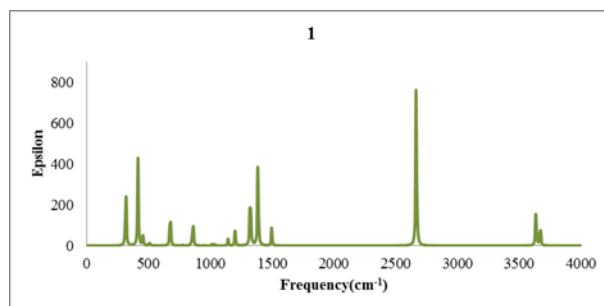
ادامه شکل ۹.

همان‌طور که شکل ۹ نشان می‌دهد، در تمام نانومخروط‌های بورنیتريد، در هر دو روش، نیتروژن دارای بار منفی و بور دارای بار مثبت است. برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۴ آنگستروم برای زاویه رأس ۲۴۰ درجه، نیتروژن‌های شماره ۵، ۶ و ۸ با ۰/۳۰۹ و ۰/۲۱۸ به ترتیب در دو روش ADCH و هرشفیلد دارای بیشترین مقادیر بار منفی هستند. در دو روش ADCH و هرشفیلد، بور شماره ۴ به ترتیب با مقادیر ۰/۱۷۴ و ۰/۱۸۱ بیشترین مقادیر بار مثبت را دارد. برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۵ آنگستروم، N9 (۰/۳۵۲)، N4 (۰/۳۵۱) و N2 (۰/۳۰۵) در روش ADCH و N2 (۰/۲۶۲)، N7 و N11 (با مقدار یکسان ۰/۲۱۵) و N6 (۰/۲۱۱) در روش هرشفیلد بیشترین مقادیر بار منفی را دارند. همچنین، محاسبات نشان می‌دهد که اتم بور با شماره ۵ با مقادیر ۰/۳۳۸ و ۰/۲۷۳، به ترتیب در روش ADCH و روش هرشفیلد، بیشترین مقادیر بار مثبت را دارد. برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع مخروط ۶ آنگستروم، دو اتم نیتروژن N10 و N5 با مقدار یکسان ۰/۳۹۰ و سپس N5 با مقدار ۰/۳۰۶ در روش ADCH و دو اتم نیتروژن با شماره‌های ۱۲ و ۸ با مقدار بار یکسان ۰/۲۴۳ و سپس دو اتم نیتروژن N10 و N5 با مقدار یکسان ۰/۲۱۸ در روش هرشفیلد دارای بیشترین مقادیر بار منفی هستند. اتم‌های بور با شماره‌های ۳ و ۹ با مقدار بار یکسان ۰/۲۳۵ در روش ADCH و مقدار ۰/۲۳۴ در روش هرشفیلد دارای بیشترین مقادیر بار مثبت هستند. برای نانومخروط‌های بورنیتريد

B2-H10 و B3-H9 با شدت ۲۴۱ km/mol است. بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی نانومخروط با ارتفاع ۲ آنگستروم به ارتعاش کششی نامتقارن H12-N1-H11 و H17-N8-H18 در حلقه دوم با مقادیر 3715cm^{-1} و 3714cm^{-1} و با شدت 45km/mol و 37km/mol اختصاص دارد.

همچنین، در این نانومخروط، بیشترین شدت با مقدار 562km/mol و فرکانس 1602cm^{-1} مربوط به ارتعاش‌های قیچی‌وار^۱ H12-N1-H11 و H17-N8-H18 در حلقه دوم است. فرکانس‌های بالاتر مربوط به ارتعاشات کششی نامتقارن در حلقه آخر نانومخروط با ارتفاع ۳ آنگستروم مخصوصاً مدهای کششی H35-N4-H36 با فرکانس 3707cm^{-1} و شدت 31km/mol و مدهای کششی H31-N1-H32 با فرکانس 3700cm^{-1} و شدت 42km/mol است. بیشترین شدت پیک به حالت تغییرشکل $\text{B}_{15}\text{N}_{15}\text{H}_{20}$ با مقادیر 1772km/mol ، 1445km/mol و 1417km/mol و به ترتیب با فرکانس‌های 1470 ، 1483cm^{-1} و 1420cm^{-1} تعلق دارد. فرکانس‌های بالاتر به ارتعاشات کششی در حلقه آخر نانومخروط با ارتفاع ۴ آنگستروم مخصوصاً مدهای کششی N7-H50 (19km/mol) و N5-H48 و N18-H53 (38km/mol) با فرکانس 3606cm^{-1} تعلق دارند. بیشترین شدت پیک به حالت تغییرشکل $\text{B}_{21}\text{N}_{24}\text{H}_{15}$ با مقادیر 3816km/mol و 2653km/mol به ترتیب با فرکانس‌های 1516cm^{-1} و 1512cm^{-1} تعلق دارد. در نانومخروط با ارتفاع ۵ آنگستروم، بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی مربوط به مدهای کششی حلقه آخر است، به طوری که مدهای کششی N-H در محدوده 3526cm^{-1} – 3607cm^{-1} و مدهای کششی B-H در محدوده 2616cm^{-1} – 2647cm^{-1} هستند. بیشترین شدت پیک به حالت تغییرشکل $\text{B}_{38}\text{N}_{42}\text{H}_{20}$ با مقادیر 6881km/mol و 5720km/mol به ترتیب با فرکانس‌های 1475cm^{-1} و 1509cm^{-1} تعلق دارد.

در شکل ۱۱، طیف IR برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۳ تا ۷ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۲۰ درجه نمایش داده شده است. در نانومخروط با ارتفاع ۳ آنگستروم، بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی مربوط به مدهای کششی حلقه آخر است، به طوری که مدهای کششی N-H در محدوده cm^{-1}



شکل ۱۰. نمودار طیف IR برای نانومخروط‌های بورنیتريد

بهینه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۱ تا ۵ آنگستروم

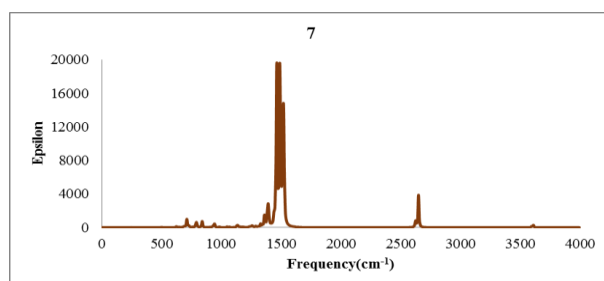
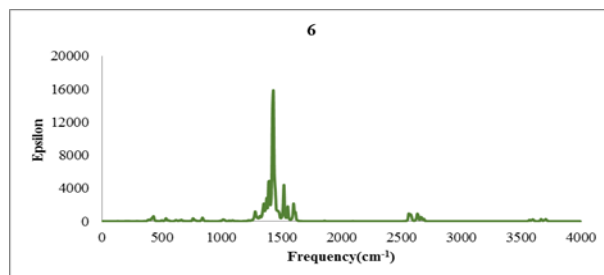
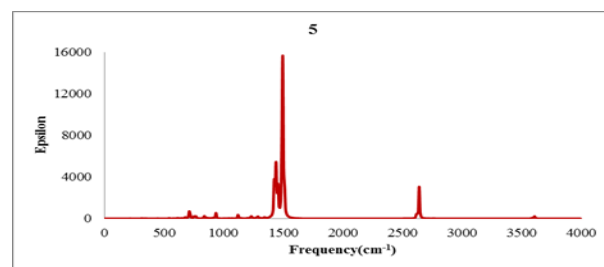
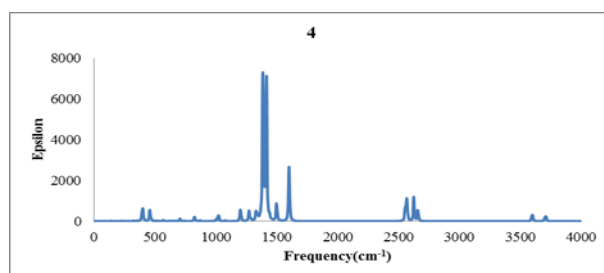
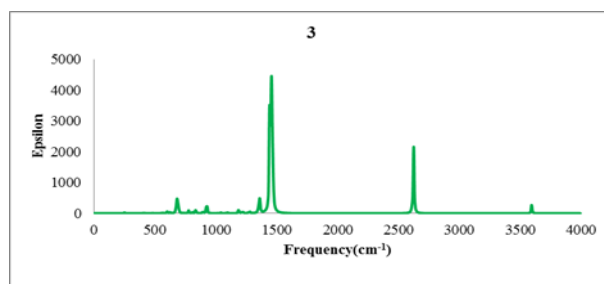
برای زاویه رأس ۶۰ درجه

اولین باند تیز در منطقه 2665cm^{-1} مربوط به مدهای کششی

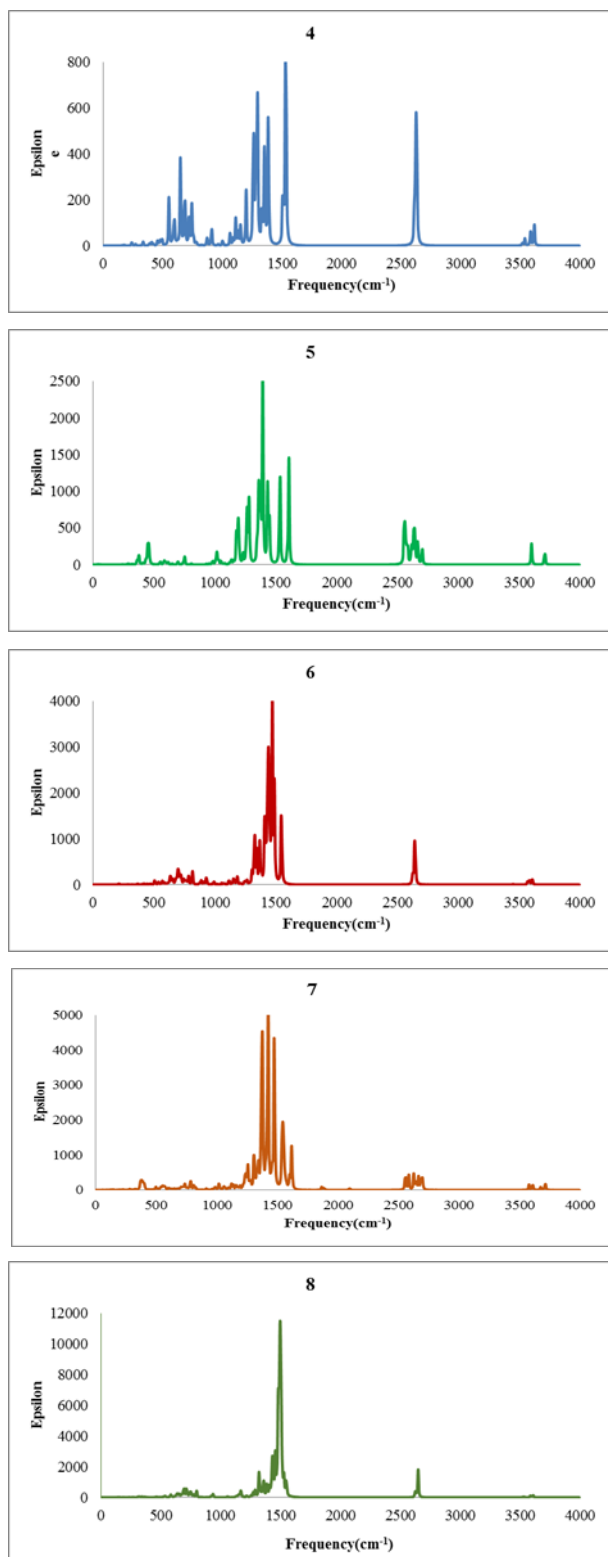
آنگستروم مربوط به مدهای کششی متقارن و نامتقارن NH_2 و BH_2 حلقه آخر است، به طوری که مدهای کششی H-N-H در محدوده $3710-3595\text{cm}^{-1}$ و مدهای کششی H-B-H در محدوده $2659-2557\text{cm}^{-1}$ هستند. همچنین، بیشترین شدت پیک (139km/mol) در فرکانس 1272cm^{-1} مربوط به حالت تغییرشکل $\text{B}_{12}\text{N}_{12}\text{H}_{16}$ است. در نانومخروط با ارتفاع ۵ آنگستروم، بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی مربوط به مدهای کششی حلقه آخر است، به طوری که مدهای کششی N-H در محدوده $3606-3587\text{cm}^{-1}$ و مدهای کششی B-H در محدوده $2642-2617\text{cm}^{-1}$ هستند. بیشترین شدت پیک به حالت تغییرشکل $\text{B}_{18}\text{N}_{18}\text{H}_{12}$ با مقادیر 732km/mol و 679km/mol به ترتیب با فرکانس‌های 1457cm^{-1} و 2639cm^{-1} اختصاص دارد. بیشترین فرکانس‌های ارتعاشی در نانومخروط با ارتفاع ۶ آنگستروم مربوط به مدهای کششی متقارن و نامتقارن NH_2 و BH_2 حلقه آخر است، به طوری که مدهای کششی H-N-H در محدوده $3708-3563\text{cm}^{-1}$ و مدهای کششی H-B-H در محدوده $2686-2561\text{cm}^{-1}$ هستند. همچنین، بیشترین شدت پیک (3675km/mol) در فرکانس 1432cm^{-1} و سپس 1396cm^{-1} (2399km/mol) و 1425cm^{-1} (3066km/mol) مربوط به حالت تغییرشکل $\text{B}_{24}\text{N}_{24}\text{H}_{24}$ است. در نانومخروط با ارتفاع ۷ آنگستروم، بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی مربوط به مدهای کششی حلقه آخر است، به طوری که مدهای کششی N-H در محدوده $3607-3592\text{cm}^{-1}$ و مدهای کششی B-H در محدوده $26492-2619\text{cm}^{-1}$ هستند. بیشترین شدت پیک به حالت تغییرشکل $\text{B}_{32}\text{N}_{32}\text{H}_{16}$ با مقادیر 7474km/mol و 6695km/mol به ترتیب با فرکانس‌های 1490cm^{-1} و 1462cm^{-1} اختصاص دارد.

در شکل ۱۲، طیف IR برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه شده با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۸۰ درجه نمایش داده شده است. در نانومخروط با ارتفاع ۴ آنگستروم، بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی مربوط به مدهای کششی حلقه آخر است، به طوری که چهار مد کششی N-H در محدوده $3714-3516\text{cm}^{-1}$ و دو مد کششی B-H در محدوده 2617cm^{-1} و 2612cm^{-1} قرار دارند. بیشترین شدت پیک مربوط به حالت تغییرشکل $\text{B}_5\text{N}_7\text{H}_6$ با مقدار 1531km/mol و فرکانس 1531cm^{-1} است. بالاترین

مدهای کششی B-H در محدوده $3592-3594\text{cm}^{-1}$ و مدهای کششی N-H در محدوده $2612-2617\text{cm}^{-1}$ هستند. بیشترین شدت پیک به حالت تغییرشکل $\text{B}_8\text{N}_8\text{H}_8$ با مقادیر 1702km/mol و 1329km/mol به ترتیب با فرکانس‌های 1459cm^{-1} و 1443cm^{-1} تعلق دارد.



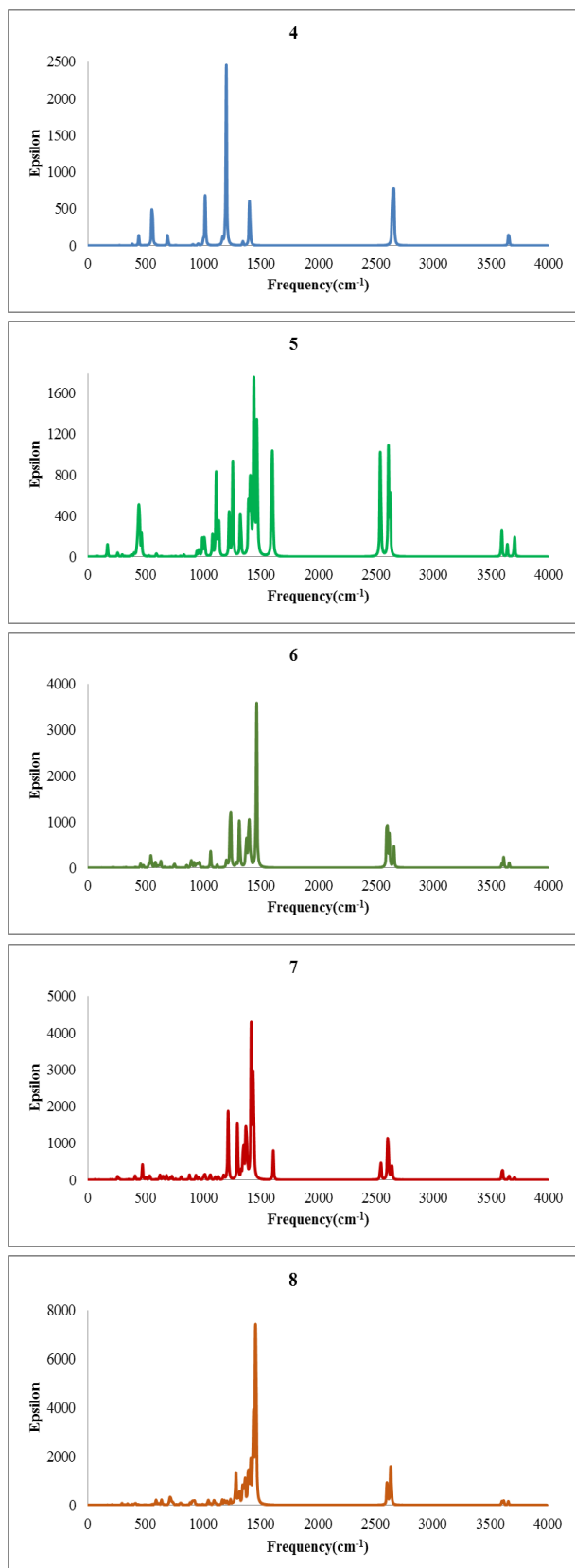
شکل ۱۱. نمودار طیف IR برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه شده با ارتفاع‌های مخروط ۳ تا ۷ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۲۰ درجه بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی در نانومخروط با ارتفاع ۴



شکل ۱۲. نمودار طیف IR برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۱۸۰ درجه

در شکل ۱۳، طیف IR برای نانومخروط‌های بورنیتريد بهینه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم برای زاویه رأس ۲۴۰ درجه نمایش داده شده است. در نانومخروط با ارتفاع ۴

فرکانس‌های ارتعاشی در نانومخروط با ارتفاع ۵ آنگستروم مربوط به مدهای کششی متقارن و نامتقارن NH_2 و BH_2 حلقه آخر است، به طوری که فرکانس‌های 3710cm^{-1} و 3707cm^{-1} مربوط به دو مد کششی نامتقارن H-N-H و ارتعاشات کششی متقارن H-N-H در فرکانس‌های 3601cm^{-1} و 3598cm^{-1} و همچنین چهار مد کششی نامتقارن H-B-H در محدوده $2701-2630\text{cm}^{-1}$ و چهار مد کششی متقارن H-B-H در محدوده $2614-2555\text{cm}^{-1}$ است. در این نانومخروط، بیشترین شدت پیک (780km/mol) در فرکانس 1393cm^{-1} است که مربوط به حالت تغییرشکل $\text{B}_9\text{N}_9\text{H}_{12}$ است. در نانومخروط با ارتفاع ۶ آنگستروم، بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی مربوط به مدهای کششی حلقه آخر است، به طوری که شش مد کششی N-H در محدوده $3605-3449\text{cm}^{-1}$ و سه مد کششی B-H در محدوده 2643cm^{-1} و 2627cm^{-1} و 2622cm^{-1} وجود دارند. بیشترین شدت پیک به حالت تغییرشکل $\text{B}_{12}\text{N}_{15}\text{H}_9$ با مقدار 116km/mol و فرکانس 1471cm^{-1} اختصاص دارد. بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی در نانومخروط با ارتفاع ۷ آنگستروم مربوط به مدهای کششی متقارن و نامتقارن NH_2 و BH_2 حلقه آخر است، به طوری که فرکانس‌های 3712cm^{-1} ، 3707cm^{-1} و 3671cm^{-1} مربوط به سه مد کششی نامتقارن H-N-H و فرکانس‌های 3605cm^{-1} ، 3604cm^{-1} و 3575cm^{-1} مربوط به مد کششی متقارن H-N-H و همچنین فرکانس‌های محدوده $2697-2625\text{cm}^{-1}$ مربوط به شش مد کششی نامتقارن H-B-H و فرکانس‌های محدوده $2583-1865\text{cm}^{-1}$ مربوط به شش مد کششی متقارن H-B-H هستند. در این نانومخروط، بیشترین شدت پیک (1560km/mol) در فرکانس 1474cm^{-1} و سپس (1339km/mol) در فرکانس 1423cm^{-1} است که مربوط به حالت تغییرشکل $\text{B}_{18}\text{N}_{18}\text{H}_{18}$ است. در نانومخروط با ارتفاع ۸ آنگستروم، بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی مربوط به مدهای کششی حلقه آخر است، به طوری که هشت مد کششی N-H در محدوده 3518cm^{-1} و چهار مد کششی B-H در محدوده $2660-2648\text{cm}^{-1}$ قرار دارند. بیشترین شدت پیک مربوط به حالت تغییرشکل $\text{B}_{22}\text{N}_{26}\text{H}_{12}$ با مقدار 3178km/mol در فرکانس 1492cm^{-1} و 3140km/mol و 1500cm^{-1} است.



شکل ۱۳. نمودار طیف IR برای نانومخروط‌های بورنیتريد

بهینه‌شده با ارتفاع‌های مخروط ۴ تا ۸ آنگستروم

برای زاویه رأس ۲۴۰ درجه

کششی متقارن H-B-H با فرکانس 2541cm^{-1} (حلقه آخر) در

آنگستروم، بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی مربوط به سه مد کششی N-H با فرکانس‌های 3653cm^{-1} ، 3651cm^{-1} و 3650cm^{-1} و سه مد کششی B-H با فرکانس‌های 2656cm^{-1} ، 2645cm^{-1} و 2644cm^{-1} قرار دارند. بیشترین شدت پیک به حالت تغییرشکل $B_4N_4H_6$ با مقدار 370km/mol و 371km/mol در فرکانس 1199cm^{-1} تعلق دارد. بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی در نانومخروط با ارتفاع ۵ آنگستروم مربوط به مدهای کششی نامتقارن NH_2 در حلقه آخر است، به طوری که در این نانومخروط فرکانس‌های ارتعاشی 3702cm^{-1} و 3701cm^{-1} مربوط به دو مد کششی نامتقارن H-N-H، فرکانس 3640cm^{-1} مربوط به مد کششی N-H، فرکانس‌های 3591cm^{-1} و 3590cm^{-1} مربوط به دو مد کششی متقارن H-N-H و همچنین فرکانس 2622cm^{-1} مربوط به مد کششی B-H، فرکانس‌های 2608cm^{-1} و 2605cm^{-1} مربوط به دو مد کششی نامتقارن H-B-H و فرکانس‌های 2541cm^{-1} و 2536cm^{-1} مربوط به دو مد کششی متقارن H-B-H هستند. در این نانومخروط، بیشترین شدت پیک (595km/mol) در فرکانس 1438cm^{-1} و سپس (541km/mol) در فرکانس 1467cm^{-1} دیده می‌شود که مربوط به حالت تغییرشکل $B_6N_6H_{10}$ است. در نانومخروط با ارتفاع ۶ آنگستروم، مد کششی N-H با فرکانس 3656cm^{-1} در حلقه اول و سپس سه مد کششی N-H در حلقه آخر با فرکانس‌های 3608cm^{-1} ، 3607cm^{-1} و 3592cm^{-1} بالاترین فرکانس‌ها را دارند. در ضمن، فرکانس‌های B-H در حلقه اول 2654cm^{-1} و در حلقه آخر 2616cm^{-1} ، 2599cm^{-1} و 2594cm^{-1} است. در این نانومخروط، بیشترین شدت پیک (1204km/mol) در فرکانس 1462cm^{-1} است که مربوط به حالت تغییرشکل $B_7N_7H_8$ است. بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی در نانومخروط با ارتفاع ۷ آنگستروم مربوط به مد کششی نامتقارن H-N-H در حلقه آخر با فرکانس 3701cm^{-1} ، مدهای کششی N-H با فرکانس‌های 3653cm^{-1} (حلقه اول) و 3599cm^{-1} و 3598cm^{-1} (حلقه آخر) و مد کششی متقارن H-N-H در حلقه آخر با فرکانس 3594cm^{-1} است. همچنین، مد کششی B-H با فرکانس 2636cm^{-1} (حلقه اول)، مد کششی نامتقارن H-B-H با فرکانس 2607cm^{-1} (حلقه آخر)، مد کششی B-H با فرکانس 2603cm^{-1} (حلقه آخر) و مد

بیشترین بار منفی روی اتم‌های نیتروژن حلقه آخر و بیشترین بار مثبت روی اتم‌های بور حلقه دوم (نانومخروط با ارتفاع‌های ۳ و ۴ آنگستروم)، حلقه سوم (نانومخروط با ارتفاع‌های ۵ و ۷ آنگستروم) و حلقه چهارم (نانومخروط با ارتفاع ۶ آنگستروم) متمرکز شده است. بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی در حلقه‌های آخر به مد کششی N-H (نانومخروط با ارتفاع ۳، ۵ و ۷ آنگستروم) و مد کششی نامتقارن H-N-H (نانومخروط با ارتفاع ۴ و ۶ آنگستروم) اختصاص دارد.

$B_{22}N_{26}H_{12}$ ، به دلیل داشتن کمترین گاف انرژی و سختی، واکنش‌پذیری بیشتری در بین نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۱۸۰ درجه دارد. همچنین، این مولکول، به دلیل ممان دوقطبی، قطبش‌پذیری و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی بالاتر از بقیه بقیه نانومخروط‌ها با زاویه رأس ۱۸۰، نرمی بیشتری دارد. همچنین، دارای کمترین مقدار متوسط طول پیوند و بیشترین مقدار متوسط مرتبه پیوند N-N است. در تمام این نانومخروط‌ها، بیشترین بار منفی روی اتم‌های نیتروژن حلقه آخر و بیشترین بار مثبت روی اتم‌های بور حلقه اول (نانومخروط با ارتفاع ۶، ۷ و ۸ آنگستروم) و حلقه دوم (نانومخروط با ارتفاع‌های ۴ و ۵ آنگستروم) متمرکز شده است. بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی در حلقه‌های آخر به مد کششی N-H (نانومخروط با ارتفاع ۴، ۶ و ۸ آنگستروم) و مد کششی نامتقارن H-N-H (نانومخروط با ارتفاع ۵ و ۷ آنگستروم) اختصاص دارد. در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۲۴۰ درجه، $B_{14}N_{14}H_{10}$ واکنش‌پذیری بیشتر (گاف انرژی و سختی کمتر) و نرمی بیشتر (ممان دوقطبی، قطبش‌پذیری و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی بالاتر) و کمترین مقدار متوسط طول پیوند B-N را بین سایر نانومخروط‌ها با زاویه رأس ۲۴۰ دارد. در تمام این نانومخروط‌ها، بیشترین بار منفی روی اتم‌های نیتروژن حلقه آخر و بیشترین بار مثبت روی اتم‌های بور حلقه اول (نانومخروط با ارتفاع ۴، ۵ و ۸ آنگستروم) و حلقه دوم (نانومخروط با ارتفاع‌های ۶ و ۷ آنگستروم) متمرکز شده است. بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی در حلقه‌های آخر به مد کششی N-H (نانومخروط با ارتفاع ۴، ۶ و ۸ آنگستروم) و مد کششی نامتقارن H-N-H (نانومخروط با ارتفاع ۵ و ۷ آنگستروم) اختصاص دارد. نتایج نشان می‌دهد: در تمام نانومخروط‌ها با زاویه‌های ۶۰، ۱۲۰، ۱۸۰ و ۲۴۰ درجه، (۱) در نمودارهای DOS

این نانومخروط وجود دارند. بیشترین شدت پیک (1235 km/mol) در فرکانس 1417 cm^{-1} و سپس (1158 km/mol) در فرکانس 1435 cm^{-1} دیده می‌شود که مربوط به حالت تغییرشکل $B_{10}N_{10}H_{10}$ است. بیشترین فرکانس‌های ارتعاشی در نانومخروط با ارتفاع ۸ آنگستروم مربوط به مد کششی N-H در حلقه اول با فرکانس 3654 cm^{-1} ، چهار مد کششی N-H در حلقه آخر در محدوده فرکانس 3599 cm^{-1} - 3613 cm^{-1} ، مد کششی B-H در حلقه اول با فرکانس 2638 cm^{-1} و چهار مد کششی B-H در حلقه آخر در محدوده فرکانس 2602 cm^{-1} - 2632 cm^{-1} است. بیشترین شدت پیک (1852 km/mol) در فرکانس 1456 cm^{-1} و سپس (1336 km/mol) در فرکانس 1438 cm^{-1} است که به حالت تغییر شکل $B_{14}N_{14}H_{10}$ تعلق دارد.

۴- نتیجه‌گیری

در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۶۰ درجه، $B_{38}N_{42}H_{20}$ کمترین گاف انرژی و سختی و همچنین بیشترین ممان دوقطبی و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی را دارد. بنابراین، این مولکول، در مقایسه با بقیه مولکول‌های دارای زاویه رأس ۶۰ درجه، نرمی و واکنش‌پذیری بیشتری دارد. این نانومخروط دارای کمترین مقدار متوسط مرتبه پیوند B-N است. در تمام این نانومخروط‌ها، بیشترین بار منفی روی اتم‌های نیتروژن حلقه آخر و بیشترین بار مثبت روی اتم‌های بور حلقه اول (نانومخروط با ارتفاع‌های ۱ و ۲ آنگستروم) و حلقه سوم (نانومخروط با ارتفاع‌های ۳، ۴ و ۵ آنگستروم) متمرکز شده است. بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی در حلقه‌های آخر به مد کششی N-H (نانومخروط با ارتفاع ۱، ۴ و ۵ آنگستروم) و مد کششی نامتقارن H-N-H (نانومخروط با ارتفاع ۲ و ۳ آنگستروم) اختصاص دارد.

در نانومخروط‌های بورنیتريد با زاویه رأس ۱۲۰ درجه، نانومخروط با ارتفاع مخروط ۶ آنگستروم دارای گاف انرژی کمتر، سختی کمتر و در نتیجه واکنش‌پذیری بیشتر است. نانومخروط $B_{32}N_{32}H_{16}$ دارای بیشترین ممان دوقطبی، قطبش‌پذیری و قطبش‌پذیری آنیزوتروپی و کمترین مقدار متوسط طول پیوند B-N است. در تمام این نانومخروط‌ها،

8. Ignaczak, A., & Gomes, J. N. (1996). Interaction of halide ions with copper: the DFT approach. *Chemical Physics Letters*, 257(5-6), 609-615. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(96\)00603-3](https://doi.org/10.1016/0009-2614(96)00603-3)
9. Kalantarian, M. M. (2019). Theoretical Evaluation of Behaviours and Properties of LiFePO₄ as Li-ion Battery Cathode Material: a DFT Study. *Journal of Advanced Materials and Technologies*, 8(1), 45-53. <https://doi.org/10.30501/jamt.2019.88927>
10. Krungleviciute, V., Calbi, M. M., Wagner, J. A., Migone, A. D., Yudasaka, M., & Iijima, S. (2008). Probing the structure of carbon nanohorn aggregates by adsorbing gases of different sizes. *The Journal of Physical Chemistry C*, 112(15), 5742-5746. <https://doi.org/10.1021/jp710524q>
11. Liao, M.-L. (2012). A study on hydrogen adsorption behaviors of open-tip carbon nanocones. *Journal of Nanoparticle Research*, 14(4), 837. <https://doi.org/10.1007/s11051-012-0837-1>
12. Lijima, S., Ichihashi, T., & Ando, Y. (1992). Pentagons, heptagons and negative curvature in graphite microtubule growth. *Nature*, 356(6372), 776-778. <https://doi.org/10.1038/356776a0>
13. López, N., & Illas, F. (1998). Ab initio modeling of the metal-support interface: the interaction of Ni, Pd, and Pt on MgO (100). *The Journal of Physical Chemistry B*, 102(8), 1430-1436. <https://doi.org/10.1021/jp972626q>
14. Lu, T., & Chen, F. (2012a). Atomic dipole moment corrected Hirshfeld population method. *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, 11(01), 163-183. <https://doi.org/10.1142/S0219633612500113>
15. Lu, T., & Chen, F. (2012b). Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. *Journal of computational chemistry*, 33(5), 580-592. <https://doi.org/10.1002/jcc.22885>
16. Machado, M., Mota, R., & Piquini, P. (2003). Electronic properties of BN nanocones under electric fields. *Microelectronics journal*, 34(5-8), 545-547. [https://doi.org/10.1016/S0026-2692\(03\)00044-2](https://doi.org/10.1016/S0026-2692(03)00044-2)
17. Majidi, R., & Tabrizi, K. G. (2010). Study of neon adsorption on carbon nanocones using molecular dynamics simulation. *Physica B: Condensed Matter*, 405(8), 2144-2148. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2010.01.122>
18. Mayer, I. (1983). Charge, bond order and valence in the AB initio SCF theory. *Chemical Physics Letters*, 97(3), 270-274. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(83\)80005-0](https://doi.org/10.1016/0009-2614(83)80005-0)
19. Mayer, I., & Salvador, P. (2004). Overlap populations, bond orders and valences for 'fuzzy' atoms. *Chemical Physics Letters*, 383(3-4), 368-375. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2003.11.048>
20. Mirzaei, M., Yousefi, M., & Meskinfam, M. (2012). Chemical shielding properties for BN, BP, AlN, and AlP nanocones: DFT studies. *Superlattices and Microstructures*, 51(6), 809-813. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2012.03.028>
21. Saadh, M., Amin, A., Farhadiyan, S., Sadeghi, M., Shahrtash, S., Maaliw III, R., Hanaf, A. S., Kiasari, B. A., Da'i, M., & Mirzaei, M. (2023). Sensing functions of an iron-doped boron nitride nanocone towards acetaminophen and its thio/thiol analogs: A DFT outlook. *Diamond and Related Materials*, 133, 109749. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2023.109749>
22. Sripirom, J., Noor, S., Köhler, U., & Schulte, A. (2011). Easily made and handled carbon nanocones for scanning tunneling microscopy and electroanalysis. *Carbon*, 49(7), 2402-2412. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2011.02.007>
23. Yu, S.-S., & Zheng, W.-T. (2010). Effect of N/B doping on the electronic and field emission properties for carbon nanotubes, carbon nanocones, and graphene nanoribbons. *Nanoscale*, 2(7), 1069-1082. <https://doi.org/10.1039/C0NR00002G>
24. Zhi, C., Bando, Y., Tang, C., & Golberg, D. (2005). Electronic structure of boron nitride cone-shaped nanostructures. *Physical Review B*, 72(24), 245419. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.245419>

جایی که انرژی چگالی حالت‌ها صفر شده است، گاف انرژی در محدوده بازه انرژی‌های HOMO و LUMO قرار دارد؛ ۲) مرتبه پیوند بین تمام اتم‌ها از مرتبه یک است و همچنین نتایج حاصل از روش MBO با روش FBO تقریباً یکسان است؛ ۳) تمام اتم‌های نیتروژن دارای بار منفی و تمام اتم‌های بور دارای بار مثبت هستند و ۴) بالاترین فرکانس‌های ارتعاشی مربوط به مدهای کششی آخرین حلقه است و فرکانس‌های ارتعاشی مربوط به مدهای کششی N-H یا H-N-H بالاتر از مدهای کششی B-H یا H-B-H هستند. بیشترین شدت مربوط به حالت تغییرشکل آن نانومخروط است.

۵- سپاسگزاری

این کار با توجه به طرح ۹۹/۱۶۲۴ در گروه نیمه‌هادی‌ها، پژوهشگاه علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران انجام شده است.

مراجع

1. Adisa, O. O., Cox, B. J., & Hill, J. M. (2011). Open carbon nanocones as candidates for gas storage. *The Journal of Physical Chemistry C*, 115(50), 24528-24533. <https://doi.org/10.1021/jp2069094>
2. Arjmandi, M., Pourafshari Chenar, M., Peyravi, M., Jahanshahi, M., Arjmandi, A., & Shokui Rad, A. (2018). Interpreting the CO₂ adsorption on functionalized organic group of IRMOF-1: A B3LYP DFT based study. *International Journal of Engineering*, 31(9), 1473-1479. https://www.ije.ir/article_73300.html
3. Baei, M. T., Peyghan, A. A., & Bagheri, Z. (2013). Carbon nanocone as an ammonia sensor: DFT studies. *Structural Chemistry*, 24, 1099-1103. <https://doi.org/10.1007/s11224-012-0139-314>
4. Becke, A. D. (1992). Density-functional thermochemistry. I. The effect of the exchange-only gradient correction. *The Journal of Chemical Physics*, 96(3), 2155-2160. <https://doi.org/10.1063/1.464913>
5. Doroudi, Z., & Jalali Sarvestani, M. R. (2020). Boron nitride nanocone as an adsorbent and sensor for Ampicillin: A Computational Study. *Chemical Review and Letters*, 3(3), 110-116. <https://doi.org/10.22034/crl.2020.233274.1061>
6. Golberg, D., Bando, Y., Kurashima, K., & Sato, T. (2001). Synthesis and characterization of ropes made of BN multiwalled nanotubes. *Scripta Materialia*, 44(8-9), 1561-1565. [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(01\)00724-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(01)00724-2)
7. Hsieh, J.-Y., Chen, C., Chen, J.-L., Chen, C.-I., & Hwang, C.-C. (2009). The nanoindentation of a copper substrate by single-walled carbon nanocone tips: a molecular dynamics study. *Nanotechnology*, 20(9), 095709. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/9/095709>