

# مطالعه‌ی نظری تأثیر ناخالصی Si بر ویژگی الکترونی و ترمودینامیکی نانوفولرن C<sub>76</sub> در حلال‌های متفاوت

محمد حسین فکری\*، مریم رضوی مهر

گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت‌الله بروجردی، بروجرد، ایران

## چکیده

داپینگ یا آلوده کردن مولکول‌ها مخصوصاً نانولوله‌ها و فولرن‌ها باعث بهبود بسیاری از ویژگی الکترونی و ترمودینامیکی آنها می‌شود. در این تحقیق، نانو فولرن C<sub>76</sub> که کمتر مورد مطالعه قرار گرفته است، در نظر گرفته و یک اتم Si جایگزین یک اتم کربن شد. با استفاده از نرم‌افزارهای اسپارتان و گوسین ساختار نانو فولرن C<sub>76</sub> و کلاستر C<sub>75</sub>Si طراحی و بهینه شد. به کمک خروجی‌های گوسین توصیفگرهای کوانتومی دو مولکول مانند انرژی هومو و لومو، گاف انرژی، ممان دوقطبی، پتانسیل شیمیایی، سختی شیمیایی، الکتروفیلیسیته، ماکزیم انتقال بار و سایر پارامترها محاسبه و برخی ویژگی آنها با هم مقایسه شد. در پژوهش حاضر، از مدل پیوسته قطبی (PCM) برای توصیف خواص ترمودینامیکی این دو مولکول در حلال‌های متفاوت شامل تولوئن، اتانول، دی‌کلرومتان، دی‌اتیل سولفوکسید و سیکلوهگزان استفاده شد. نتایج نشان می‌دهد ناخالصی باعث افزایش ممان دوقطبی، الکتروفیلیسیته و ماکزیم انتقال بار و کاهش گاف انرژی و سختی شیمیایی فولرن C<sub>76</sub> می‌شود که این به معنی افزایش واکنش‌پذیری و حلالیت فولرن با استفاده از داپینگ است.

**واژه‌های کلیدی:** اسپارتان ۱۰، گوسین ۰۹، فولرن C<sub>76</sub>، داپینگ، پتانسیل شیمیایی، توابع ترمودینامیکی

ایمیل نویسنده مسئول: [m.h.fekri@abru.ac.ir](mailto:m.h.fekri@abru.ac.ir)

## ۱- مقدمه

فولرن اولین مولکول کروی است که شناخته شده است. کشف فولرن به سال ۱۹۸۵ میلادی برمی‌گردد. در این سال سه دانشمند به نام‌های کروتو، اسمالی و کارل مطالعه‌ی تهیه‌ی کلاسترهای کروی پرداختند. پس از انجام آزمایشات و آنالیزهای طیف‌سنجی محصولات، مولکول‌های C<sub>60</sub> کشف شد. از دیگر فولرن‌های شناخته شده می‌توان به موارد زیر اشاره کرد. C<sub>24</sub>، C<sub>70</sub>، C<sub>76</sub> و C<sub>84</sub>.

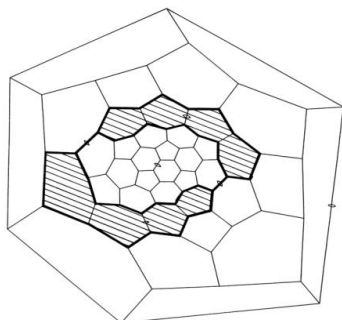
در سال ۱۹۹۰ وقتی که مقدار بیشتری از فولرن تهیه شد، بررسی دانشمندان نشان داد که این مولکول‌ها کاملاً واکنش‌پذیر هستند [۱]. از مهم‌ترین واکنش‌های شیمیایی که فولرن‌ها انجام می‌دهند عبارتند از: هیدروژناسیون، اکسیداسیون، واکنش نوکلئوفیلی، واکنش رادیکالی و تشکیل کمپلکس‌های فلزی. از کاربردهای مهم فولرن‌ها می‌توان به ویژگی آنتی‌اکسیدانی، حامل دارویی، استفاده در سلول‌های خورشیدی و سنسورها و ... اشاره کرد [۲-۱۳]. نانوخوشه‌ها به دلیل ویژگی‌های نوری، الکترونیکی، مغناطیسی و کاتالیزوری خاص، توجه دانشمندان را به خود اختصاص داده‌اند [۱۴ و ۱۵]. از جمله نانوقفس‌ها C<sub>60</sub> است که مورد توجه است. با توجه به هیبریداسیون این مولکول‌های قفس مانند، به عنوان مواد جدید با ویژگی‌های خاص در نظر گرفته می‌شوند [۱۶ و ۱۷].

داپینگ باعث تغییرات چشمگیری در ویژگی نانولوله‌ها شده است. ری و همکارانش سنتز هترو فولرن‌ها را گزارش کرده‌اند [۱۸]. در این تحقیق نشان داده شده است که خوشه‌ها دارای اتم‌های سیلیس در فولرن هستند. این نتایج توسط روش‌های محاسباتی تایید شده است [۱۹]. داپینگ فولرن C<sub>60</sub> توسط فلزها نیز باعث ویژگی ابررسانایی آن می‌شود [۲۰]. اگر اتم‌های سیلیس بتوانند جایگزین اتم‌های کربن در فولرن‌ها شوند، واکنش‌پذیری مکان‌های Si فولرن‌ها را به سمت پلیمریزاسیون سوق خواهد داد [۲۱]. تاکنون، سنتز موفقیت‌آمیز C<sub>60</sub>-Si<sub>n</sub> (n=1-3) گزارش شده است [۲۲-۲۴].

علیرغم این واقعیت که ویژگی C<sub>60</sub> و C<sub>70</sub> در دهه‌ی گذشته به طور گسترده مورد بررسی قرار گرفته است، اما در مورد فولرن‌های بالاتر مانند C<sub>76</sub> و C<sub>84</sub> اطلاعات بسیار کمی در دست است که در این پژوهش سعی شده است که با استفاده از جایگزینی یک اتم سیلیس به جای یک اتم کربن در فولرن C<sub>76</sub> ویژگی آن مورد بررسی قرار گیرد.

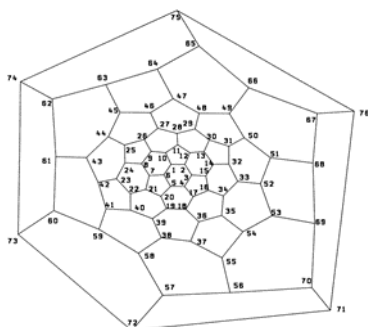
## ۲- مدل‌سازی

در این کار ابتدا با استفاده از نرم‌افزار Spartan 10 ساختار نانوفولرن طراحی و رسم شد و سپس ساختار نانوفولرن C<sub>76</sub> و نانو کلاستر C<sub>75</sub>Si به کمک نرم‌افزار Gaussian 09 و روش محاسبه‌ی نظریه‌ی تابع چگالی (DFT) و در سطح B3LYP/6-31G<sup>+</sup> بدون هیچگونه محدودیت تقارنی بهینه سازی شدند

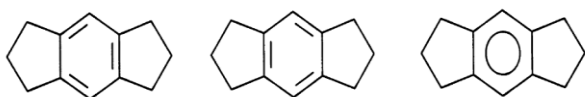


شکل ۲. دیاگرام  $C_{76}$  که ارتباط آن را با  $C_{60}$  نشان داده است. مناطق هاشور خورده دو منطقه قطبی تفکیک شده را نشان می‌دهد.

در  $C_{76}$  دو حوزه‌ی اتصال نسبت به  $C_{60}$  وجود دارد که دو تا از این اتصالات شش ضلعی در پایان محور چرخشی از کربن شماره ۳۳-۳۴ و ۴۳-۴۴ عبور می‌کند که منجر به دو منطقه مسطح جزئی می‌شود. نمایش هر یک از این دو محور اتصال موجب انحراف قابل توجهی از یک کره می‌شود. اتصال قطعات ۶ ضلعی با ساختارهای ککوله مانند که یک پیوند دوگانه با ۵ ضلعی‌های مجاور دارد (شکل ۳ و ۴).



شکل ۳. طرح شماره گذاری شده از  $C_{76}$ .



شکل ۴. اتصال قطعات  $C_{76}$  که در آن یک ۶ ضلعی در لبه‌های متفاوت با ساختارهای ککوله مانند مستقر شده‌اند.

گاف انرژی، اختلاف میان دو سطح انرژی هومو و لومو است. هر چه اختلاف میان دو سطح انرژی هومو و لومو بیشتر باشد، به علت افزایش انرژی لازم برای انتقال الکترون میان این دو سطح، انتقال الکترون بین این دو سطح، سخت‌تر شده و در نتیجه واکنش‌پذیری کاهش می‌یابد. جانشینی سیلیسیم در فولرن  $C_{76}$  بر روی انرژی‌های هومو و لومو تاثیرگذار بوده در نتیجه بر روی مقدار انرژی گپ تاثیر گذاشت که باعث کاهش انرژی گپ شد. در نتیجه واکنش‌پذیری  $C_{76}Si$  بیشتر از  $C_{76}$  می‌شود (جدول ۱). البته داپینگ بر روی ویژگی ساختاری و الکترونی فولرن‌ها اثر می‌گذارد و مقدار این تاثیر وابسته به

(شکل ۱). با استفاده از خروجی‌های گوسین برخی ویژگی الکترونی (توصیفگرهای کوانتومی) مانند انرژی بالاترین اوربیتال مولکولی دارای الکترون ( $E_{HOMO}$ )، انرژی پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده ( $E_{LUMO}$ ) و گاف انرژی ( $E_g$ ) یا  $\Delta$  و سایر پارامترهای مهم مانند پتانسیل شیمیایی ( $\mu$ )، سختی شیمیایی ( $\eta$ )، الکتروفیلیسیتی ( $\omega$ ) و ماکزیمم انتقال بار ( $\Delta N_{max}$ ) به کمک روابط زیر محاسبه شدند [۳۰-۲۵].

$$E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad (۱)$$

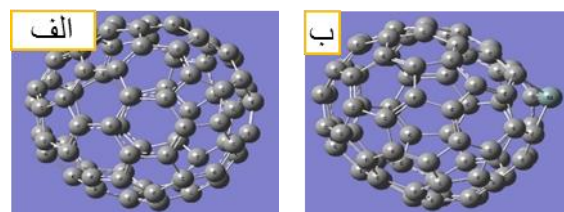
$$\mu = -\frac{IP + EA}{2} \quad (۲)$$

$$\eta = \frac{E_{LUMO} - E_{HOMO}}{2} \quad (۳)$$

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta} \quad (۴)$$

$$\Delta N_{max} = -\frac{\mu}{\eta} \quad (۵)$$

در رابطه‌ی ۲،  $IP (-E_{HOMO})$  و  $EA (-E_{LUMO})$  به ترتیب انرژی یونیزاسیون و انرژی الکترونخواهی هستند. سپس، ویژگی ترمودینامیکی مولکول‌های  $C_{76}$  و  $C_{76}Si$  به دست آمدند و اثر برخی حلال‌ها مانند تولوئن، اتانول، دی‌کلرومتان، دی‌اتیل سولفوکسید و سیکلوهگزان بر این توابع نیز مورد بررسی قرار گرفت.



شکل ۱. ساختار بهینه شده الف-  $C_{76}$  و ب-  $C_{76}Si$  در سطح B3LYP/6-31G

### ۳- تجزیه و تحلیل نتایج

ساختار  $C_{76}$  از گسترش  $C_{60}$  در امتداد یک محور چرخشی به دست آمد که شامل دو منطقه‌ی قطبی (دو ۶ ضلعی و شش ۵ ضلعی) می‌شود. ۱۶ اتم اضافی در منطقه استوایی با تشکیل ۸ شش ضلعی اضافی وارد می‌شوند (شکل ۲).

جدول ۱. مقادیر توصیفگرهای کوانتومی (برحسب eV) و توابع ترمودینامیکی برای  $C_{75}Si$  و  $C_{76}$ 

| توصیفگر کوانتومی   | $C_{76}$   | $C_{75}Si$ |
|--------------------|------------|------------|
| $E_{HOMO}$         | -4.62      | -4.33      |
| $E_{LUMO}$         | 2.35       | 2.00       |
| $E_g$              | 6.97       | 6.33       |
| $\mu$              | -1.13      | -1.16      |
| $\eta$             | 3.48       | 3.16       |
| $\omega$           | 0.18       | 0.21       |
| $\Delta N_{max}$   | 0.32       | 0.37       |
| انرژی پایداری (au) | -2842.8219 | -3090.9544 |
| ZPE (kJ/mol)       | 1439.02    | 1420.34    |
| $H^0$ (au)         | -2842.2516 | -3090.3903 |
| $S^0$ (j/mol)      | 586.34     | 600.90     |
| $G^0$ (j/mol)      | -2842.3182 | -3090.4586 |

از ویژگی مهم دیگر، که می‌توان با استفاده از خروجی داده‌های گوسین به آن پرداخت، می‌توان به ویژگی نیمه رسانایی اشاره کرد. از جمله نانوساختارهایی که دارای ویژگی نیمه رسانایی هستند و کاربردهای وسیعی در زمینه‌های متفاوت دارند می‌توان به فولرن‌ها اشاره کرد. فولرن‌ها به دلیل تحرک بالای الکترون‌هایشان به طور گسترده‌ای به عنوان نیمه رسانای نوع n شناخته می‌شوند. ویژگی نیمه‌رسانایی اجسام به انرژی گپ بستگی دارد. در نیمه رساناها انرژی گپ کمتر از ۳/۲ eV است. محاسبات نشان می‌دهد که مقدار انرژی گپ برای  $C_{75}Si$  برابر ۰/۲۳۲ eV و برای  $C_{76}$  برابر ۰/۲۳۰ eV است. این بدان معنی است که هر دو ویژگی نیمه رسانایی دارند. ولی با جایگزینی سیلیسیم به جای یک اتم کربن انرژی گپ بیشتر شده است که نشان می‌دهد  $C_{76}$  رساناتر از  $C_{75}Si$  است به عبارتی ویژگی نیم رسانایی  $C_{75}Si$  از  $C_{76}$  بیشتر است.

جدول ۲، ویژگی‌های کلاسترهای  $C_{75}Si$  و  $C_{76}$  را در حلال‌های متفاوت و اثرات این حلال‌ها را نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود برای هر دو ترکیب  $C_{75}Si$  و  $C_{76}$  انرژی کایوتاسیون ( $\Delta G_{cav}$ ) در حلال‌های متفاوت به ترتیب زیر افزایش می‌یابد.

ethanol < dichloromethane < Cyclohexane < toluene < dimethyl sulfoxide

همچنین، انرژی حلال‌پوشی ( $\Delta G_{solv}^0$ ) برای این دو کلاستر به ترتیب زیر افزایش می‌یابد.

Cyclohexane < ethanol < toluene < dichloromethane < dimethyl sulfoxide

تعداد اتم داپ شده و نوع فولرن است. جانشینی اتم ناخالص در ساختار فولرن موجب تغییرات موضعی در ساختار ترکیب می‌شود. سیلیسیم برخلاف کربن که دارای هیبریداسیون پایدار  $sp^2$  است، هیبرید  $sp^3$  دارد. در نتیجه تغییرات ساختاری و انرژی گپ ممکن است به دلیل اعوجاج ساختاری اتم سیلیسیم در ترکیب داپ شده باشد.

از مهم‌ترین پارامترهای دیگری که مقدار واکنش‌پذیری یک مولکول را نشان می‌دهد می‌توان به پتانسیل شیمیایی ( $\mu$ )، سختی شیمیایی ( $\eta$ )، الکتروفیلیسیته ( $\omega$ ) و ماکزیم انتقال بار ( $\Delta N_{max}$ ) اشاره کرد.

از نظر فیزیکی پتانسیل شیمیایی ( $\mu$ )، تمایل فرار الکترون از یک سیستم تعادلی را نشان می‌دهد. هرچه پتانسیل شیمیایی بزرگ‌تر باشد، پایداری کمتر و واکنش‌پذیری بیشتر می‌شود اما در یک مولکول، سختی شیمیایی ( $\eta$ )، مقاومت در برابر تغییر در توزیع الکترونی یا انتقال الکترونی (یا انتقال بار) است. هنگامی که دو مولکول با یکدیگر واکنش می‌دهند، یک مولکول به عنوان یک سیستم نوکلئوفیلی (هسته‌دوستی) و دیگری به عنوان یک سیستم الکتروفیلی (الکترون‌دوستی) عمل می‌کند. الکتروفیلیسیته ( $\omega$ )، یک پارامتر مهم است که وابسته به پتانسیل شیمیایی و سختی شیمیایی است و به عبارتی به طور غیرمستقیم وابسته به انرژی سطوح هومو و لومو است که بر واکنش‌پذیری ساختار تاثیر می‌گذارد.

در نهایت بیشترین بار الکتریکی که سیستم الکتروفیل می‌تواند بپذیرد، ماکزیم انتقال بار ( $\Delta N_{max}$ ) نام دارد. به عبارتی  $\Delta N_{max}$  گنجایش بار مولکول را نشان می‌دهد.

با جایگزینی یک اتم Si به جای یک اتم کربن در فولرن  $C_{76}$  مشاهده شد که پتانسیل شیمیایی و ماکزیم انتقال بار افزایش می‌یابد و گاف انرژی و سختی شیمیایی کاهش می‌یابد (جدول ۱) این مطلب نشان دهنده‌ی استعداد بیشتر  $C_{75}Si$  نسبت به  $C_{76}$  برای انجام واکنش است.

ممان دوقطبی معیاری از عدم توزیع یکنواخت بار است و مقدار قطبیت در مولکول را بیان می‌کند. هرچه اختلاف الکترونگاتیوی میان دو اتم بیشتر باشد مقدار ممان دو قطبی در آن پیوند بیشتر و پیوند قطبی‌تر می‌شود. مقدار ممان دوقطبی به دست آمده برای  $C_{75}Si$  برابر ۱/۹۰ دای است در صورتی که  $C_{76}$  غیرقطبی بوده و دارای ممان دوقطبی صفر است. افزایش مقدار ممان دوقطبی در  $C_{75}Si$ ، در حقیقت بیانگر افزایش مقدار حلالیت آن نسبت به  $C_{76}$  در حلال‌های قطبی و نیز دلیل دیگری بر افزایش واکنش‌پذیری فولرن  $C_{76}$  توسط داپینگ است. همچنین، نتایج حاصل از خروجی داده‌های گوسین در جدول ۱ نشان می‌دهد که با افزایش یک اتم سیلیسیم به ساختار کلاستر  $C_{76}$  انرژی پایداری و پارامترهای ترمودینامیکی آن افزایش می‌یابد. به عبارتی، فرایند داپینگ با کاهش آنتالپی و انرژی آزاد گیبس و افزایش آنتروپی همراه است که بیانگر گرمازا بودن و خودبخودی بودن فرایند است که در ترمودینامیک امری مطلوب است.

همچنین، نتایج نشان می‌دهد انرژی‌های حل شدن در حلال‌های

متفاوت در  $C_{76}Si$  نسبت به  $C_{76}$  بیشتر است.

جدول ۲. مقادیر توابع ترمودینامیکی ( $\text{kJ mol}^{-1}$ ) کلاستر  $C_{76}$  و  $C_{76}Si$  در حلال‌های متفاوت و دمای ۲۹۸ K

| حلال              | کلاستر     | $\Delta G_{\text{cav}}$ | $\Delta G_{\text{cl}}$ | $\Delta G_{\text{rep}}$ | $\Delta G_{\text{disp}}$ | $\Delta G_{\text{tr}}$ | $\Delta_{\text{solv}} G^0$ |
|-------------------|------------|-------------------------|------------------------|-------------------------|--------------------------|------------------------|----------------------------|
| تولون             | $C_{76}$   | 199.22                  | -0.25                  | 17.22                   | -201.68                  | 13.47                  | 27.98                      |
|                   | $C_{76}Si$ | 201.73                  | -2.76                  | 16.64                   | -196.92                  | 13.47                  | 32.16                      |
| اتانول            | $C_{76}$   | 184.63                  | -0.63                  | 9.95                    | -183.33                  | 14.95                  | 25.57                      |
|                   | $C_{76}Si$ | 186.97                  | -6.06                  | 9.61                    | -179.03                  | 14.95                  | 26.44                      |
| دی کلرومتان       | $C_{76}$   | 185.30                  | -0.50                  | 9.91                    | -178.65                  | 14.73                  | 30.79                      |
|                   | $C_{76}Si$ | 187.64                  | -5.31                  | 9.57                    | -174.35                  | 14.73                  | 32.28                      |
| دی متیل سولفوکسید | $C_{76}$   | 237.59                  | -0.63                  | 12.1                    | -215.44                  | 14.46                  | 48.08                      |
|                   | $C_{76}Si$ | 240.68                  | -6.27                  | 11.70                   | -210.38                  | 14.46                  | 50.19                      |
| سیکلو هگزان       | $C_{76}$   | 187.68                  | -0.29                  | 10.24                   | -193.74                  | 13.42                  | 17.31                      |
|                   | $C_{76}Si$ | 190.06                  | -2.30                  | 9.91                    | -189.23                  | 13.42                  | 21.86                      |

#### ۴. نتیجه گیری

افزایش مقدار گاف انرژی، پتانسیل شیمیایی، الکترونیلیسیته، ماکزیم انتقال بار و کاهش سختی شیمیایی بر اثر ناخالصی بیانگر افزایش واکنش‌پذیری فولرن  $C_{76}$  است.

نتایج نشان می‌دهد که عمل داپینگ باعث افزایش ممان دو قطبی می‌شود که نشانه‌ی افزایش انحلال فولرن در حلال‌های قطبی بالاخص حلال آب خواهد بود.

نتایج حاصل از داده‌های ترمودینامیکی نشان می‌دهد که افزایش اتم سیلیس به ساختار فولرن باعث کاهش آنتالپی و کاهش انرژی آزاد گیبس می‌شود که امری مطلوب و با ارزش از دیدگاه ترمودینامیک است. به عبارتی باعث پایداری فولرن می‌شود که البته انرژی پایداری محاسبه شده هم موید این مطلب است.

بررسی مقادیر توابع ترمودینامیکی کلاستر  $C_{76}$  و  $C_{76}Si$  در حلال‌های متفاوت نیز نشان می‌دهد که داپینگ باعث بهبود این توابع می‌شود که از مهم‌ترین این توابع می‌توان به انرژی حلال‌پوشی اشاره کرد.

نتیجه‌ی نهایی اینکه جایگزینی یک اتم سیلیس به جای یک اتم کربن در فولرن باعث بهبود بسیاری از ویژگی الکترونی و ترمودینامیکی فولرن می‌شود و بالطبع با افزایش اتم‌های بیشتر نتایج بهتری نیز حاصل خواهد شد.

#### ۵. منابع

- [1]. H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, Nature, 318, 162–163, (1985).
- [2]. D. Wang, H. Xu, Z. Su, D. Comp. & Theo. Chem., 978, 166–171, (2011).
- [3]. D. Wang, X. Wang, X. Gao, D. Hou, Comp. and & Theo. Chem., 989, 33–38, (2012).

[4]. M. Moradi, M. Nouraliei, R. Moradi, Phys. E: Low-dimen. Sys. and Nanostructures, 87, 186–191, (2017).

[5]. H. Bai, Y. Ai, and Y. Huang, Phys. Status Solidi B, 248, 969–973, (2011).

[6]. H. Bai, W. Qiao, Y. Zhu, Y. Huang, Diamond and Related Materials, 26, 20–24, (2012).

[7]. F. L. Liu, Chem. Phys. Lett., 471, 116–121, (2009).

[8]. M. N. Huda A. K. Ray, Chem. Phys. Lett., 457, 124–129, (2008).

[9]. X. Xu H. S. Kang, Chem. Phys. Lett., 441, 300–304, (2007).

[10]. R. H. Xie, L. Jensen, G. W. Bryant, J. Zhao, V. H. Smith Jr., Chem. Phys. Lett., 375, 445–451, (2003).

[11]. Y. Chai, T. Guo, C. Jin et al., J. of Phys. Chem., 95, 7564–7568, (1991).

[12]. Ö. Alver, M. Bilge, N. Atar, C. Parlak, M. Snyel, J. of Mole. Liq.s, 231, 202–205, (2017).

[13]. O. Ergürhan, C. Parlak, Ö. Alver, M. Snyel, J. of Mole. Structure, 1167, 227–231, (2018).

[14]. O. Vostrowsky A. Hirsch, Chem. Rev., 106, 5191–5207, (2006).

[15]. X. Chen, J. Chang, Q. Ke, Carbon, 126, 53–57, (2018).

[16]. C. Ray, M. Pellarin, J. L. Lerme', J.L. Vialle, M. Broyer, X. Blase, P. Me'linon, P. Ke'ghe'lian, A. Perez, Phys. Rev. Lett., 80, 5365, (1998).

[17]. C.C. Fu, M. Weissmann, M. Machado, P. Ordejón, Phys. Rev. B., 63, 85411, (2001).

[18]. T. Kimura, T. Sugai, H. Shinohara, Chem. Phys. Lett., 256, 269, (1996).

[19]. M. Pellarin, C. Ray, P. Me'linon, J. Lerme', J. L. Vialle, P. Ke'ghe'lian, A. Perez, M. Broyer, Chem. Phys. Lett. 277, 96, (1997).



- [20]. I. M. L. Billas, C. Massobrio, M. Boero, M. Parrinello, W. Branz, F. Tast, N. Malinowski, M. Heinebrodt, T.P. Martin, J. Chem. Phys., 111, 6787, (1999).
- [21]. A. Hirsch, M. Brettreich, Fullerenes: Chem. & Reac., Willey VCH. Verlag GmbH, 2005.
- [22]. Z. Zhou, Pharmaceutics, 5, 525, (2013).
- [23]. S. Vahid shetab boushehri, et al. Acta Medica Iranica, 48, 342, (2010).
- [24]. R. Ahmadi, et al., Int. J. of Bio-Inorg. Hybrid Nanomat., 4, 249, (2015).
- [25]. R. Ahmadi, Int. J. Nano. Dimens 8 (3), 250-256, (2017).
- [26]. M. H. Fekri, A. Omrani, S. Jamehbozorgi, M. Razavi Mehr, Advanced Journal of Chemistry-Section A 2(1), 14-20, (2019).
- [27]. M. H. Fekri, R. Bazvand, M. Solymani, M. Razavi Mehr, International Journal of Nano Dimension, 11(4), 346-354, (2020).
- [28]. Z. khajehali, H. Shamlouei, Journal of Research on Many-body Systems, 9(3), 121-134, (2019).
- [29]. M. H. Fekri, R. Bazvand, M. Solymani, M. Razavi Mehr, Physical Chemistry Research, 11(4), 346-354, (2020).
- [30]. M. H. Fekri, A. Beyranvand, H. Dashti Khavidaki, M. Razavi Mehr, International Journal of Nano Dimension, 12(2), 156-163, (2021).





## Theoretical study of the effect of Si impurities on the electronic and thermodynamic properties of C76 nanofullerin in different solvents

Mohammad Hossein Fekri\*, Maryam Razavi Mehr

Department of Chemistry, Faculty of Basic Sciences, Ayatollah Borujerdi University

### Abstract:

Doping or contaminating molecules, especially nanotubes and fullerenes, improves many of their electronic and thermodynamic properties. In this study, C76 nanofullerene was considered that less studied and a-Si atom replaced a carbon atom. The structure of the C76 nano-fullerene and C75Si cluster was designed and optimized using Spartan and Gaussian software. Using Gaussian outputs, quantum descriptors of two molecules such as HOMO and LUMO energy, energy gap, bipolar moment, chemical potential, chemical hardness, electrophilicity, maximum charge transfer, and other parameters were calculated and some of their properties were compared. In the present study, the continuous polar model (PCM) was used to describe the thermodynamic properties of these molecules in different solvents including toluene, ethanol, dichloromethane, dimethyl sulfoxide, and cyclohexane. The results show that the impurity increases the dipole moment, electrophilicity, and maximum charge transfer and reduces the energy gap, and chemical hardness of fullerene C76, which means that the reactivity and solubility of fullerene by doping.

**Keywords:** Spartan 10, Gaussian 09, Fullen C76, Dopping, Chemical potential, Thermodynamic functions