

به نام خدا

بررسی کوانتومی حلقه‌زایی در فولرن‌ها

فولرن، یکی از ۵ آلوتروپ اتم کربن است. در فولرن، اتم‌های کربن به صورت خوشه‌ای تجمع کرده و تشکیل مولکول‌های قفس مانند می‌دهند. این دسته از ترکیبات به علت شباهت بسیار زیاد به توپ فوتبال به "باکی‌بال" معروف‌اند. فولرن‌ها در طبیعت، در حین آتش‌سوزی و صاعقه پدید می‌آیند. شکل زیبا و بی‌سابقه‌ی فولرن‌ها و خواص شگفت‌انگیز آنها، توجه بسیاری از دانشمندان را به خود جلب نموده است. واکنش‌پذیری، الکترون‌خواهی، خواص الکتریکی و بسیاری از پارامترهای دیگر، از جمله خواص قابل بررسی و بسیار مهم این ترکیبات است.

از جمله واکنش‌های مهمی که این مولکول‌ها در آن شرکت می‌کنند، واکنش حلقه‌زایی است، که در دسته‌ی فرآیندهای افزایشی قرار می‌گیرد. واکنش حلقه‌زایی، روشی برای عامل‌دار کردن فولرن‌ها به‌شمار می‌رود، که با کمک آن می‌توان به مشتقات بسیار پرکاربرد از این مولکول‌ها دست پیدا کرد.

در این سمینار به بررسی کوانتومی حلقه‌زایی در باکی‌بال‌ها می‌پردازیم. در بررسی‌های محاسباتی حلقه‌زایی C_{60} از روش AM1 بهره می‌گیریم و حلقه‌زایی ۶ - ۶ را نسبت به حلقه‌زایی ۵ - ۶ مقایسه می‌کنیم و ایزومرهای بدست‌آمده در طی حلقه‌زایی ۱ و ۳ بوتادی‌ان روی C_{60} را تا رسیدن به محصول نهایی بررسی می‌نماییم. هدف از تئوری فعلی، گسترش دانش این روند از نظر سینتیکی با تعیین Ts از حلقه‌زایی دیلز آلدِر ۱ و ۳ بوتادی‌ان است که منجر به هگزاافزایشی می‌گردد. در ادامه‌ی بحث، فرآیند حلقه‌زایی [۲+۲] در واکنش بین $C_4H_4X_2$ یا $C_2O_2X_2$ با قفس C_{20} با کمک روش B3LYP مورد بررسی قرار گرفته است. در پایان نیز به بررسی کوانتومی دیمیریزاسیون دو قفس C_{20} پرداختیم و پایداری هر یک از ایزومرهای این واکنش را به کمک دو روش تئوری B3LYP و HF بررسی نمودیم تا بتوانیم، ایزومر قابل قبول از نظر سینتیکی و ترمودینامیکی را بیابیم.