

عنوان مقاله:

بررسی متغیرهای ترمودینامیکی فولرین در شرایط ایزوترم و ایزوبار بوسیله شیمی نظری

محل انتشار:

اولین کنفرانس ملی علوم و فناوری نانو (سال: 1389)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

محمد عرفان زند - فارس فیروزآباد دانشگاه آزاد اسلامی دانشکده تحصیلات تکمیلی گروه شیمی

اصغر راکب

پوریا عباسی

ایمان غروری

خلاصه مقاله:

فولرین را ریچارد اسمالی، رابرت کرل و هاری کروتو در سال 1985 در دانشگاه رایس هوستون خلق کردند. باکی بال مولکولی از 60 اتم کربن به صورت شش ضلعی ها و پنج ضلعی های به هم پیوسته ای ارایش یافته اند در اندک زمانی فولرین های دیگری کشف شدند که از 20 تا چند صد اتم کربن داشتند در این مقاله مطالعه نظری C20 در شرایط مختلف ایزوترم و ایزوبار متغیرهای ترمودینامیکی انتروپی، انتالپی و انرژی گیبس مورد بررسی قرار گرفته است تمامی محاسباتی با روش نظری تابع چگال و سطح محاسبه $G+31-6^*$ با بهره گیری از نرم افزار گوسین 03 انجام شده است.

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/104060>

