

عنوان مقاله:

بررسی خواص مایع یونی بر روی فولرن

محل انتشار:

پنجمین کنفرانس بین المللی مطالعات جهانی در علوم تکنولوژی و مهندسی (سال: 1400)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

اشرف السادات قاسمی - دانشگاه پیام نور تهران

رضا نجف پور - دانشگاه پیام نور تهران

خلاصه مقاله:

در این مطالعه به جذب سطحی مایع یونی ۴ (۳) Butyl-1-imidazolium-1-butanesulfonate بر روی فولرن آلاییده شده با حلقه بورن-نیتزید با استفاده از روش نظریه تابعی چگالی (DFT) الکترون پرداخته شد. انرژی جذب منفی نشاندهنده امکان پذیر بودن واکنش از لحاظ ترمودینامیکی است. بررسی پیوندی های ملکولی نشان میدهد که جذب سطحی دارو بر روی نانولوله صورت گرفته است. در نتیجه این محاسبات ن فولرن آلاییده شده قابلیت حمل مایع یونی را دارد.

کلمات کلیدی:

مایع یونی، فولرن آلاییده شده، نظریه تابعی چگالی، گوسین ۹

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1409316>

