

## عنوان مقاله:

مطالعه کوانتومی جذب سطحی گاز هیدروژن روی نانوساختار C20 و مقایسه آن با ساختارهای جایگزین شده با Si

## محل انتشار:

اولین همایش نانومواد و نانو تکنولوژی (سال: 1390)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

## نویسندگان:

فهیمة محمایی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد شهرری گروه شیمی

عاطفه علیزاده

فرخ رویانیکمرام

## خلاصه مقاله:

در این کار پژوهشی ساختار C20(bowl) که انتهای کربنها با اتمهای هیدروژن بسته شده اند طراحی و محاسبات کوانتومی بهینه سازی با روش تئوری تابع دانسیته MPW1PW91 و سری پایه 6-31G++ انجام میگردد جهت مقایسه قابلیت جذب و ذخیره سازی گاز برسطح این ساختار پس از بهینه سازی ساختار H2(bowl) C20 فاصله بهینه گاز هیدروژن از سطح فولرن و نیز انرژی جذب حاصل میشود جایگزینی هترواتمها بجای کربن در C20(bowl) قابلیت جذب و ذخیره گاز هیدروژن را افزایش میدهد از این رو با جایگزینی اتم Si بجای یکی از اتمهای کربن در موقعیت پنتا و باردیگر در موقعیت هگزا و عملیات بهینه سازی انرژی ساختارها مقایسه می شود آنالیز NBO جهت ارزیابی قدرت جذب و میزان انتقال بار پس از جذب و گپ انرژی هومو - لومو و سهم اربیتالهای S,P در ساختارهای با هترواتم و ساختار بدون هترو اتم مورد مقایسه و بررسی قرار میگیرند.

## کلمات کلیدی:

فولرن C20، جذب هیدروژن، اربیتال پیوند طبیعی NBO، سیلیکون

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/143376>

