

عنوان مقاله:

مطالعه جذب کلرورفرم روی Bi_2N_{12} فولورن به روش DFT

محل انتشار:

سومین همایش ملی شیمی، تحقیقات، فناوری ها و دستاوردها (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

فرزانه حسینی - گروه شیمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد ماهشهر

پرویز ترابی - گروه شیمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد ماهشهر

خلاصه مقاله:

با استفاده از محاسبات (Density functional theory (DFT در سطح $\text{PBE}/6\text{-}31\text{G}^*$ ، پارامترهای انرژی، ساختاری و الکترونی جذب گاز کلرورفرم روی فولورن Bi_2N_{12} به منظور پیدا کردن سنسور مناسب برای کلرورفرم بررسی شد. جذب کلرورفرم روی آن فولورن به موقعیت و جهت گیری آن بستگی ندارد. نتایج نشان می دهد که مقدار جذب گاز کلرورفرم روی آن فولورن بین $3\text{-}13\text{ kJ/mol}$ می باشد. مقادیر انرژی Gap آن فولورن با ورود کلرورفرم تا حدی تغییر کرده از این رو آن فولورن می تواند به عنوان یک سنسور مناسب برای شناسایی کلرورفرم عمل نماید

کلمات کلیدی:

کلرورفرم، سنسور، Bi_2N_{12} ، DFT

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1521348>

