سیویلیکا – ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:

بررسی فرآیند جذب مولکول های متیل مرکاپتان و متیل آمین بصورت گازی شکل بر روی نانولوله سیلیکون کاربید

محل انتشار:

فصلنامه پژوهش در آموزش شیمی, دوره 4, شماره 3 (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 15

نویسندگان:

صادق افشاری – استادیار رشته شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

فهیمه علیخوشی – دانشجوی کارشناسی ارشد رشته شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

خلاصه مقاله:

در این کار تحقیقاتی، ابتدا به مطالعه نحوه جذب مولکولهای متیل مرکاپتان و متیل آمین بصورت تکی و یا جفت روی سطح نانولوله سیلیکون کاربید پرداخته شده است. برای این منظور برهمکنش مولکولهای مورد نظر از جهت اتم‌های فعال با قسمت‌های متفاوت نانو لوله سیلیکون کاربید مورد مطالعه قرار گرفت. برای مطالعه این فرآیندها از روش های شیمی محاسباتی و با استفاده از نرم افزار Gaussian ۰۹ در سطح نظری m۰۶ و سری پایه ۶-۳۱۱g(d) استفاده شده است. ساختار اولیه ترکیبات توسط نرم‌افزار GaussView طراحی و تمام ساختارها ازنظر انرژی بهینه شدند. انرژی جذب، پارامترهای ترمودینامیکی، سطوح انرژی پتانسیل و نمودار چگالی حالت برای فرآیندهای جذب موردمطالعه قرار گرفتند. همچنین بعضی از طول و زاویه های پیوندی مهم در فرآیند جذب نیز بررسی شدند. نتایج نشان دادند که مولکول متیل مرکاپتان از جهت اتم گوگرد و مولکول متیل آمین از طرف اتم نیتروژن امکان جذب بر روی اتم‌های کربن و سیلیسیوم نانولوله سیلیکون کاربید را دارا می‌باشند و بررسی پارامترهای ترمودینامیکی حاکی از خودبخودی بودن فرآیندهای جذب می‌باشند.

کلمات کلیدی:

متیل مرکاپتان, متیل آمین, نانولوله, جذب گاز, شیمی محاسباتی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1721733