

عنوان مقاله:

محاسبات کوانتومی برای جذب سطحی مولکول CCl₄ بر روی نانو لوله های بور- نیتريد

محل انتشار:

اولین همایش ملی تصفيه آب و پسابهای صنعتی (سال: 1391)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

مهدی دستوری رزاز - دانشگاه آزاد اسلامی واحد امیدیه، گروه شیمی، امیدیه

مازیار نوعی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد ماهشهر

خلاصه مقاله:

در این مقاله، رفتار مولکول CCl₄ جذب شده روی سطح بیرونی نانوتیوپ های بور-نیتريد تک دیواره ی زیگزاگ (8،0) و (6،0) و 4 و 0 آرمیچر (5،4 4،4) هیدروژنه شده، با کمک محاسبات DFT مطالعه شده است. بهینه سازی هندسی با روش تئوری B3LYP/6-31G در برنامه ی گوسین 98 انجام گردیده است. ما برهم کنش های طبیعی گاز CCl₄ در سایت های مشخص شده ی نانو تیوپ را انتخاب و بررسی نمودیم. انرژی پیوند مربوط به جذب CCl₄ محاسبه گردید و در محدوده ی 0.2 - تا 2.3 - کیلو کالری بر مول می باشد. از بین تمامی حالت های اتصال CCl₄ روی هر 5 نانوتیوپ بور- نیتريد، حالت پایین-Cl- بیشترین پایداری را دارا می باشد.

کلمات کلیدی:

نانو تیوپ بور- نیتريد، جذب سطحی، مکانیک کوانتوم DFT

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/181967>

