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

عنوان مقاله:
مطالعه تئوری نگهداری هیدروژن برروی C59B M M=Na به روش DFT

محل انتشار:
اولین همایش ملی فناوری های نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:
احسان زاهدی - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد شاهرود*

سعیدرضا امامیان
فاطمه بیکی
جواد آجودانی

خلاصه مقاله:
دراین تحقیق انرژی جذب فلزNa برروی هتروفولرن C 59B وهمچنین انرژی جذب هیدروژن درکمپلکسهای فلزی سدیم با هتروفولرن C 59B به روش DFT مورد بررسی قرارگرفت بهینه سازی ساختارها و محاسبات NBO با استفاده ازروش MPW1PW91 ومجموعه پایه -G*31 6 با استفاده ازنرم افزارگوسین 03انجام شد انرژی جذب اولین هیدروژن برروی این کمپلکس فلزی گرمازا بوده ولی انرژیهای جذبسیاراندک است انرژی جذب دومین هیدروژن برروی این کمپلکس فلزی گرماگیر بوده و همچنین نتایج نشان داد که جذب هیدروژن درروی این کمپلکس فلزی به منظور استفاده ازخوردهای هیدروژنی مناسب تشخیص داده نشد کلیه ساختارها ازلحاظ الکترونی با استفاده ازنرم افزار NBO مورد مطالعه و بررسی قرارگرفتند

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/211770