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

عنوان مقاله:
مطالعه و تحقیق اثردما برمیزان جذب سطحی هیدروژن برسطح نیکل 111 با استفاده ازDFT

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

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:
لیلا نساجی جهرمی - *دکتری*

محسن شعبانی - *فوق لیسانس شیمی*

فرشته قربانی نایینی - *فوق لیسانس شیمی*

خلاصه مقاله:
دراین پژوهش انرژی گرمایی H درجذب سطحی هیدروژن را برسطح نیکل 111 درپوشش سطح θ=0/25 درمکان جذبی تاپ مطالعه شددمای محدودرفتارکوانتومی هیدروژن جذب شده درسطح نیکل 111 با استفاده ازمحاسبات DFT شبیه سازی شده است این اجازه میدهد که اتمهای واکنش دهنده را متحرک درنظر بگیریم و نشان دادیم که باکاهش دما از500به 70K و انرژی گرمایی افزایش می یابد

کلمات کلیدی:
محاسبات تابعی دانسیته، سطح نیکل 111 ، مطالعاتDFT /هیدروژن/اثردما/جذب شیمیایی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/211892