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

عنوان مقاله:
استفاده از محاسبات کوانتومی جهت انتخاب بهینه ممانعت کننده ای فلزی در مقیاس نانو

محل انتشار:
دومین همایش دانشجویی فناوری نانو (سال: 1386)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:
عفت جمالی زاده - *کرمان، دانشگاه شهید باهنر کرمان، بخش شیمی*

اسدالله ناصح زاده - *کرمان، دانشگاه شهید باهنر کرمان، بخش شیمی*

عبدالحمید جعفری - *کرمان، دانشگاه شهید باهنر کرمان، بخش مهندسی مواد*

سیدمحمدعلی حسینی - *کرمان، دانشگاه شهید باهنر کرمان، بخش شیمی*

خلاصه مقاله:
دراین کار چگونگی ارتباط پارامترهای مولگولی از طریق اعمال نظریه تابع مرکب دانسیته (DFT) به عنوان ممانعت کننده بر سطح آلومینیوم در هیدروکلریدریک اسید مورد بررسی قرار گرفته و نشان داده است که انرژی بالاترین سطح اوربینال مولکولی پر شده، انرژی پایین ترین سطح اوربیتال مولکولی خالی، انرژی کل ممانعت کننده و کمترین مقدار انرژی سیستم (ممانعت کننده /آلومینیوم) یابازده ممانعت کنندگی رابط خطی دارند. نتایج بدست آمده از بهینه سازی سیستم ممانعت کننده / آلومینیو نشان می دهد که حالت جذب در جهت جفت الکترون اتم نیتروژن عمومی ترین روند برای ممانعت کنندگی این مولکول ها می باشد. نتایج حاصل از این کار می تواند در طراحی و بهینه سازی ممانعت کننده های خوردگی مفید باشد.

کلمات کلیدی:
خوردگی ، شبیه سازی نانو ، مطالعات DFT ، ممانعت کننده

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/22834