

عنوان مقاله:

بررسی پایداری و خواص ترمودینامیکی نانو ساختارهای نیتريد بور کربن دار شده

محل انتشار:

دومین همایش ملی فناوری نانو از تئوری تا کاربرد (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

نسرین هوشمند - دکترای شیمی-فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی مرودشت

ام البنین دشت کار - کارشناس ارشد شیمی-فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی مرودشت

خلاصه مقاله:

در این کار تحقیقاتی ابتدا بهینه سازی کامل ساختار هندسی گونه ای از نانو ساختارهای نیتريد بور به نام نانو لوله نیتريد بور کربن دار شده (B20 N20 C2) با استفاده از روش محاسبات تئوری تابعیت چگالی (B3 LYP) با مجموعه پایه-3 G 21* انجام گرفت. سپس مطالعات ساختارالکترونی و ترمودینامیکی این سیستم در محیط گاز و حلال در دماهای مختلف با بدست آوردن پارامترهای مربوطه از قبیل: ساختار مولکولی، فرکانس های ارتعاشی، بار اتمها و گشتاور دو قطبی جهت بدست آوردن پایداری ساختار انجام شد. علاوه بر این با استفاده از رزونانس مغناطیس هسته (NMR) و محاسبات بار، جایگاه های فعال ملکول در فاز حلال و گاز تعیین شد و از آن در بررسی جابجایی شیمیایی و پایداری سیستم در هر دو محیط گاز و حلال استفاده گردید.

کلمات کلیدی:

نانو لوله های نیتريد بور کربن دار شده، رزونانس مغناطیس هسته، روش تئوری تابعیت چگالی، فرکانس های ارتعاشی، گشتاور دو قطبی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/289083>

