

عنوان مقاله:

بررسی جذب مولکول CO بر سطح گرافن با استفاده از نظریه تابعیت چگالی

محل انتشار:

کنفرانس ملی بهینه سازی مصرف انرژی در علوم و مهندسی (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسنده:

فاطمه اسداله زاده زارع - فارغ التحصیل دانشگاه آزاد اسلامی واحد امیدیه

خلاصه مقاله:

در این پژوهش جذب مولکول CO بر روی سطح گرافن در قالب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA و با بکارگیری تابع تعویض همبستگی پر دو - بورک - ارنزروهوف PBE مورد مطالعه قرار گرفته است از سری مبنای امواج تخت برای توصیف اربیتالهای کوهن - شم و برای الکترونهای داخلی و هسته ها از شبه پتانسیل فوق هموار استفاده شده است چندین جهت گیری مختلف و ممکن برای مولکول مورد مطالعه بر روی جایگاه های مختلف بر روی سطح گرافن مورد مطالعه قرار گرفت مشاهده شد که انرژی جذب مولکول CO بر روی صفحه گرافن در جایگاه پل و بصورت عمودی پایدارتر می باشد جذب مولکول مورد نظر به صورت مولکولی و تفکیکی مورد مطالعه قرار گرفت و معلوم شد که تفکیک مولکولهای جذب شده از نظر انرژی مطلوب نمی باشد

کلمات کلیدی:

گرافن ، نظریه تابعی چگالی ، جذب مولکول CO

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/300214>

