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

## عنوان مقاله:
مطالعه نظری خواص ترمودینامیکی یونهای فلزی سنگین، مس (II) ، کادمیم (II) ، سرب (II) توسط ساختارهای نانو و نانویی عامل دار شده

## محل انتشار:
چهارمین همایش ملی کاربردهای شیمی در فناوری های نوین (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

## نویسندگان:
بهنام فرهنگ ریک - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شرق، گروه شیمی، تهران، ایران*

لیلا صاعدی - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شرق، گروه شیمی، تهران، ایران*

معصومه عباسی - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شرق، گروه شیمی، تهران، ایران*

نوربخش فرهنگ - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شرق، گروه شیمی، تهران، ایران*

## خلاصه مقاله:
گرافن اکساید ماده ای تک لایه است که از اکسیداسیون پودر گرافیت به دست می آید و دارای خواص به نظیر مکانیکی، دمایی، سورفکتانتی و مساحت سطح بسیار بالا می باشد، نانو ساختارهای کربنی بر پایه اکسید گرافن به دلیل خواص عالی در حذف سطحی که دارای یک سطح آبدوست با گروه های کیلیت کننده عملکرد مناسبی در حذف یونهای فلزی از محیط آبی نشان می دهند. در این پژوهش با استفاده از نرم افزار گوسین مولکولهای مانند گرافن اکساید، 6-آمینو اوراسیل و اتیلن دی آمین که با یون فلزی مس، کادمیم و سرب دوچه شده بودن به صورت نظری با استفاده از تئوری تابعی چگالی (DFT) مبتنی بر تابعی هیبریدی B(3)LYP با مجموعه پایه 31g(d,p-6) مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات بهینه سازی و خواص ترمودینامیکی با درنظر گرفتن اثر حلال (آب) با روش PCM انجام شده. تعیین میزان پایداری مولکول از طریق محاسبه انرژی، تعیین انرژی گرمایی و میزان واکنش پذیری سیستم در فاز حلال مورد بررسی قرار گرفت. لازم به تأکید است که برای فلزات سنگین از مجموعه پایه مناسب آنان یعنی lanl2dz استفاده شده است، این محاسبات نشان می دهد که میزان پایداری و برهمکنش یون فلزی مس برای جذب سطحی شدن روی سطح اتیلن دی آمین بیشتر است (به خاطر گروه عاملی زیادی که دارد) و این جاذب و جذب شونده به عنوان فیلتر مناسب برای حذف آلاینده ها می توان استفاده کرد.

## کلمات کلیدی:
گوسین، خواص ترمودینامیکی، نظریه تابعیت چگالی، فیلتر، گرافن اکساید

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/372985