

## عنوان مقاله:

بررسی خواص انرژیستیک مشتقات ماده پر انرژی TEX با نانو ساختارهای فولرنی دارای کربن متفاوت در شرایط مختلف دمایی، به روش DFT

## محل انتشار:

دومین کنفرانس بین المللی یافته های نوین پژوهشی در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

## نویسندگان:

رویا احمدی - عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره)، شهر ری

مهدی عزتی - عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره)، شهر ری

طاهره بروشکی - عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره)، شهر ری

## خلاصه مقاله:

در این تحقیق مشتقات ماده پر انرژی TEX با فولرنهای دارای کربن متفاوت در شرایط مختلف دمایی، به روش تئوری تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفت. برای این منظور ابتدا مواد مورد نظر بهینه سازی هندسی شدند، سپس محاسبات مربوط به پارامترهای ترمودینامیکی بر روی همه آنها انجام شد. سپس روند تغییرات پارامترهای وابسته به انرژی جملی ظرفیت گرمایی ویژه، آنتالپی، آنتروپی و انرژی آزاد گیبس نسبت به جرم مولکولی، حجم مولکول و سطح اندازگیری شده در این تحقیق در دمای معین، نسبت به هم مورد ارزیابی قرار گرفت.

## کلمات کلیدی:

مشتقات ماده پر انرژی، فولرنهای دارای کربن متفاوت، TEX، روش تئوری تابعی چگالی

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/477637>

