

عنوان مقاله:

بررسی تاثیر نحوه اتصال نانو ساختار B(12)N(12) با ماده پر انرژی TEX بر خواص انرژیستیک مشتقات حاصله 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 سنتز مشتقات قفس بور نیتريد با ماده پر انرژی TEX در شرایط مختلف دمایی، به روش تئوری تابعیچگالی مورد مطالعه قرار گرفت. برای این منظور ابتدا مواد موجود در طرفین واکنش بهینه سازی هندسی شدند، سپس محاسبات مربوط به پارامترهای ترمودینامیکی بر روی همه آنها انجام شد. سپس مقادیر ΔH , ΔG , ΔS این واکنش در دماهای مختلف به صورت تفاوت مجموع این پارامترها در محصولات به مواد اولیه به دست آمده است. و در آخر بهترین دما برای سنتز ماده منفجره با توجه به پارامترهای ترمودینامیکی حاصله مورد ارزیابی قرار گرفت.

کلمات کلیدی:

قفس بور نیتريد ، TEX ، روش تئوری تابعی چگالی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/477638>

