

عنوان مقاله:

مطالعه تاثیر نانو ساختارهای مختلف دارای کربن مشابه در مشتقات ماده پر انرژی TNT در شرایط مختلف دمایی، به روش محاسباتی

محل انتشار:

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

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

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

نسترن مداح زاده دارینی - عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره)، شهر ری، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

در این تحقیق مشتقات ماده پر انرژی TNT با نانو ساختارهای مختلف دارای کربن مشابه 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 از جمله ظرفیت گرمایی ویژه، آنتالپی، آنتروپی و انرژی آزاد گیبس نسبت به جرم مولکولی، حجم مولکولو سطح اندازه گیری شده در این تحقیق در دمای معین، نسبت به هم مورد ارزیابی قرار گرفت.

کلمات کلیدی:

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

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/477896>

