

عنوان مقاله:

بررسی محاسباتی تاثیر جرم، حجم و سطح بر خواص انرژیستیک مشتقات ماده پرمفجره RDX با فولرنهای دارای کربن متفاوت

محل انتشار:

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

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

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

حمیده شهزاد - عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره)، شهرری، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

در این تحقیق مشتقات ماده پر انرژی RDX 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 انرژیاز جمله ظرفیت گرمایی ویژه، آنتالپی، آنتروپی و انرژی آزاد گیبس نسبت به جرم مولکولی، حجم مولکول و سطح اندازهگیری شده در این تحقیق در دمای معین، نسبت به هم مورد ارزیابی قرار گرفت.

کلمات کلیدی:

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

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/477899>

