

عنوان مقاله:

مطالعه نظری پارامترهای ترمودینامیکی تشکیل مشتق ماده TNC با نانو ساختار فولرن C20 در شرایط دمایی به روش تئوری تابعی چگالی

محل انتشار:

کنفرانس بین المللی مهندسی و علوم کاربردی (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

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

مریم گودرزی - دانشجوی دکتری دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهر ری تهران ایران

اشکان نصراله کلانتری - دانشجوی کارشناسی ارشد دانشگاه آزاد اسلامی تهران واحد الکترونیک

خلاصه مقاله:

در این تحقیق واکنش تشکیل مشتق تترا نیترو TNC با نانو ساختار فولرن C20 در شرایط مختلف دمایی به روش تئوری تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفت برای این منظور ابتدا مواد موجود در طرفین واکنش بهینه سازی هندسی شدند، سپس محاسبات مربوط به محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی بر روی همه آنها انجام شد سپس مقادیر ΔH ، ΔS ، ΔG 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 مشتقات ماده منفجره با توجه به پارامترهای ترمودینامیکی حاصله و مورد ارزیابی قرار گرفت.

کلمات کلیدی:

پارامترهای ترمودینامیکی، تترا نیترو TNC، نانو ساختار فولرن C20

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/483202>

