

عنوان مقاله:

بررسی پارامترهای ترمودینامیکی تشکیل مشتقات TNT با نانو ساختار گرافن و قفس بور نیتريد در شرایط مختلف دمای به روش تئوری تابعی چگالی

محل انتشار:

سومین کنفرانس ملی و اولین کنفرانس بین المللی پژوهش های کاربردی در علوم شیمی و مهندسی شیمی و سومین کنفرانس ملی و اولین کنفرانس بین المللی پژوهش های کاربردی در زیست شناسی (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:

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

فاطمه اکبری لسبو - عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام (ره)، شهر ری، تهران ایران

خلاصه مقاله:

در این تحقیق واکنش تشکیل مشتقات 2، 4، 6 تری نیتروتولون TNT با نانو ساختار گرافن و قفس بور نیتريد در شرایط مختلف دمای، 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 پارامترهای ترمودینامیک بر روی همه آنها انجام شد. سپس مقادیر ΔS ، ΔG ، ΔH 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 باتوجه به پارامترهای ترمودینامیکی حاصله مورد ارزیابی قرار گرفت.

کلمات کلیدی:

آنتالپی تشکیل، 2، 4، 6 تری نیتروتولون TNT، قفس بور نیتريد، گرافن

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/517269>

