

عنوان مقاله:

بررسی پارامترهای ترمودینامیکی تشکیل مشتقات ماده 1-4- نیتروفنیل 1- هیدروژن تترازول NPHT با نانو ساختار قفسی بور نیتريد در شرایط مختلف دمایی 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: 8

نویسندگان:

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

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

فرخ رویا نیکمرام - 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 ماده 1- (4- نیتروفنیل) 1- هیدروژن تترازول NPHT با نانو ساختار قفس بور نیتريد 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 پارامترهای ترمودینامیکی بر روی همه آنها انجام شد سپس مقادیر ΔG , ΔH این واکنش در دماهای مختلف به صورت تفاوت مجموع این پارامترهای در محصولات به مواد اولیه به دست آمده است و در آخر بهترین دما برای سنتز مشتق ماده منفجره باتوجه به پارامترهای ترمودینامیکی حاصله مورد ارزیابی قرار گرفت.

کلمات کلیدی:

آنتالپی تشکیل، ماده 1- (4-نیتروفنیل) 1- هیدروژن تترازول NPHT، قفس بور نیتريد،

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/517279>

