

عنوان مقاله:

مطالعه نظری حذف گاز H₂S هوا با نانوساختارهای روی اکسید با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتومی

محل انتشار:

هشتمین همایش ملی و نمایشگاه تخصصی مهندسی محیط زیست (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 11

نویسندگان:

مینا غیاثی - دانشیار دانشگاه الزهرا (س)

محسن محسن نیا - استاد دانشگاه کاشان

طاهره سادات حسینی - دانشجوی کارشناسی ارشد شیمی فیزیک دانشگاه کاشان

خلاصه مقاله:

در این پژوهش حذف گاز آلاینده H₂S از هوا با استفاده از نانوساختار روی اکسید مورد بررسی و مطالعه قرار گرفته است. در ابتدا ساختارهای نانو روی اکسید با استفاده از نرم افزار گوسین و نظریه تابعی چگالی (DFT) در سطح B3LYP و با استفاده از سری پایه 6-31G* بهینه گردید. در مرحله بعد گاز H₂S پس از بهینه سازی در همین سطح با استفاده از روش scan از جهات مختلف به مسطح جاذب (نانو ساختار روی اکسید) نزدیک و انرژی جذب و مسیر واکنش در سطح B3LYP/6-31G* محاسبه گردید.

کلمات کلیدی:

نانو روی اکسید، گاز H₂S، محاسبات مکانیک کوانتومی، روش DFT، نرم افزار گوسین، واکنش جذب

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/529436>

