

عنوان مقاله:

بررسی ترموشیمی مشتقات مونومر سیس او 3 بوتادی ان با نانو ساختارهای هم جرم از فولرن ، نانو تیوب و نانو مخروط در دمای اتاق، به روش DFT

محل انتشار:

اولین کنفرانس و نمایشگاه بین المللی فناوری های نوین در صنعت لاستیک و پلیمر (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

رویا احمدی - دانشیار ، دکترای شیمی معدنی ، عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهرری، تهران، ایران

منیره الوند غیاثوند - کارشناسی ارشد شیمی کاربردی، عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهرری، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

در این تحقیق مشتقات مونومر ترانس او 3 بوتادی ان با نانو ساختارهای مختلف دارای کربن یکسان (هم جرم) در شرایط مختلف دمایی، به روش تیوری 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 انرژی از جمله ظرفیت گرمایی ویژه، آنتالپی، آنتروپی و انرژی آزاد گیبس نسبت به جرم مولکولی، حجم مولکول و سطح اندازه گیری شده در این تحقیق در دمای معین، نسبت به هم مورد ارزیابی قرار گرفت.

کلمات کلیدی:

مونومر ترانس او 3 بوتادی ان نانو ساختارهای دارای کربن یکسان ، فولرن، روش تیوری تابعی چگالی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/572413>

