

عنوان مقاله:

مطالعه اثر فولرن های دارای کربن متفاوت بر خواص انرژیژتیک مواد پر انرژی TEX و HMX در شرایط مختلف دمایی، به روش DFT

محل انتشار:

اولین کنفرانس ملی نانو از سنتز تا صنعت (سال: 1396)

تعداد صفحات اصل مقاله: 1

نویسندگان:

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

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

ماندانا پیراهن فروش - عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان ، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) ، شهر ری، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

در این تحقیق مشتقات مواد پر انرژی TEX و HMX با فولرن های دارای کربن متفاوت 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. ظرفیت گرمایی ویژه CV مقدار گرمایی است که به یک مول از ماده می دهند تا دمای آن یک درجه افزایش یابد، بدیهی است هر چه ماده پر انرژی تر باشد مقدار ظرفیت گرمایی ویژه CV آن کمتر است. بنابراین نتیجه گرفته می شود هر چه مولکولهای مشتقات نانو ساختارهای فولرنی مختلف با تعداد کربن متفاوت با ماده منفجره HMX و TEX دارای جرم مولکولی، حجم و سطح بیشتری باشند محصول حاصل کم انرژی تر است.

کلمات کلیدی:

مشتقات ماده پر انرژی ، فولرنهای دارای کربن متفاوت HMX ، TEX ، روش تیوری تابعی چگالی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/671992>

