

## عنوان مقاله:

بررسی کارایی گرافن با نقص ساختاری و عامل دار شده با C6H4 به عنوان ماده فعال الکترودی در ابرخازن ها

## محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 16، شماره 4 (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

## نویسندگان:

سیدمرتضی موسوی خوشدل - دانشکده شیمی دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

محمد صفی رحمانی فر - دانشکده علوم، دانشگاه شاهد، تهران

احسان تارقلی - دانشکده شیمی دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

## خلاصه مقاله:

در این تحقیق با استفاده از محاسبات DFT ظرفیت کوانتومی الکترودهای متشکل از مشتقات گرافنی مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان داد که وجود نقصهای ساختاری در غلظتهای کافی به دلیل ایجاد حالت‌های ناخالص ناشی از اوربیتال‌های pz اتمهای کربن درگیر در نقص میتواند ظرفیت کوانتومی ابرخازن پایه گرافنی را افزایش دهد. در محاسبات دیگری تاثیر عاملدار کردن صفحات گرافنی با گروه عاملی C6H4 بر روی ظرفیت کوانتومی الکترودهای پایه گرافنی مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج دلالت بر این امر داشت که در مورد گرافن عاملدار شده با این گروه عاملی، ظرفیت کوانتومی در پتانسیلهای بزرگتر از V0/1 و کوچکتر از V 0/ 1- افزایش چشمگیری نسبت به گرافن اولیه خواهد داشت. در مورد پیکربندیهای مرکب از نقص ساختاری و عاملدار شده با گروه عاملی C6H4 نتایج موید افزایش قابل توجهی در ظرفیت کوانتومی مشتقات مورد بررسی در مقایسه با گرافن اولیه بود.

## کلمات کلیدی:

ابرخازن، گرافن عاملدار شده، محاسبات DFT، ظرفیت کوانتومی

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/820381>

