سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
مطالعه ی DFT جذب گاز فسژن بر روی نانوکیج فولرن مانند (Zn12S12)

محل انتشار:
سومین همایش بین المللی نفت، گاز، پتروشیمی و HSE (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 19

نویسنده:
محمد مهدی صادقی - *دکترای تخصصی رشته مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران جنوب*

خلاصه مقاله:
در این مطالعه، ما از تئوری DFT با استفاده از تابع (B3LYP, ωb97xd) به منظور جستجو روی خواص جذب گاز فسژن روی سطح نانوکیج (Zn12S12) به عنوان یک نیمه رسانا استفاده نمودیم. ما سه آرایش ساختاری پایدار گاز فسژن جذب شده روی سطح این نانوساختار نیمه رسانا را پیدا نمودیم. مقادیر انرژی جذب گاز فسژن در محدوده ی(-86 تا -148 کیلوژول بر مول در سطح B3LYP))) و (137- تا کیلوژول بر مول 208- درسطح ((ωb97xd) با آنتالپی در محدوده ی (130- تا 186 -کیلوژول بر مول) و انرژی آزاد گیبس در محدوده ی (81- تا 142 – کیلو ژول بر مول) در دمای 298 کلوین و در سطح wb97xd محاسبه گردید که نتایج حاصله حاکی از آن بود که این فرآیند جذب، گرمازا و به صورت جذب شیمیایی خودبخودی صورت می گیرد. برای همه ی ساختارها، پارامترهای هندسی و برخی خواص الکتریکی با در نظر گرفتن بار آنالیز و مطالعه اوربیتالی مولکولی مرزی محاسبه شدند.

کلمات کلیدی:
فسژن، نیمه رسانا، تئوری ، نانوکیج، خودبخودی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/858740