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

عنوان مقاله:
مطالعه نظری جذب مولکول کربن دی اکسید و مکانیسم شکستن آن روی نانو خوشه فلزی Ni4Mo

محل انتشار:
پنجمین کنفرانس ملی پژوهش های نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:
عبدالحکیم پنق - *گروه شیمی، دانشکده علوم ، دانشگاه فرهنگیان، تهران*

علیرضا حنفی - *گروه شیمی ،دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی، قائمشهر، ایران*

مهدی قائمی - *گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه گلستان، گرگان*

خلاصه مقاله:
در این پروژه فرایند جذب و شکستن مولکول کربن دی اکسید بر روی نانو خوشه های آلیاژی Ni4Mo از طریق نظریه تابعیت چگالی بررسی شد نتایج نشان داد که مولکول کربن دی اکسید در حالتی که اتم کربن به اتم مولیبدن متصل شود و به هنگام شکستن بهر دوقسمت روی اتم مولیبدن متصل بماند هم از لحاظ سینتیکی و هم از لحاظ ترمودینامیکی مساعد می باشد. بررسی چگالی های الکترونی بعد از جذب مولکول روی خوشه فلزی نشان می دهد که چگالی الکترونی بین اتم مولیبدن و اتم کربن زیاد شده که نشان دهنده برهمکنش قوی بین مولکول و خوشه فلزی می باشد. بررسی بارهای اتمی NBO نشان می دهد که اتم مولیبدن از مولکول الکترون می گیرد و اتم نیکل به مولکول کربن دی اکسید الکترون می دهد.

کلمات کلیدی:
نانو خوشه فلزی ؛ انرژی جذب؛ کربن دی اکسید؛ نظریه تابعیت چگالی؛ بررسی سینتیکی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/909914