

عنوان مقاله:

مطالعه جذب هیدروژن مولکولی روی نانولوله های کربنی براساس پارامترهای محاسبه شده چهارقطبی هسته هیدروژن با استفاده از محاسبات ab initio

محل انتشار:

اولین کنفرانس ملی علوم و فناوری نانو (سال: 1389)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسنده:

مرجان رفیعی اردکانی - تهران دانشگاه پیام نور مرکز ورامین

خلاصه مقاله:

در این تحقیق با استفاده از نرم افزار Gaussian 98 و محاسبه پارامترهای کوپلاژ چهار قطبی هسته اتم هیدروژن تاثیر جذب ملکول هیدروژن روی نانولوله های کربنی بر روی ثوابت کوپلاژ چهار قطبی هسته اتمهای هیدروژن بررسی شده و نیز اثر برخی هترواتمها مطالعه شد. براساس نتایج این تحقیق در اثر جذب ملکول هیدروژن بر روی نانولوله کربنی مقدار ثابت کوپلاژ چهار قطبی هسته های هیدروژن افزایش می یابد اثر هترواتمهای مختلف و تعداد آنها در میزان ثابت کوپلاژ چهار قطبی هسته های هیدروژن و در نتیجه میزان دانسیته بار روی اتمهای هیدروژن موثر است و مقدار این ثوابت بسته به نوع و تعداد هترواتمها تغییر می کند این نتایج براساس میزان انتقال بار اتم هیدروژن با استفاده از محاسبه ثابت کوپلاژ چهار قطبی هسته هیدروژن پیش بینی میشود تمام محاسبات در سطح محاسباتی B3LYP/6-31G انجام شده است.

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/104213>

