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

عنوان مقاله:
بررسی خواص الاستیک نانوساختار صفحه ای سیلیسن تحت جذب شیمیایی هیدروژن

محل انتشار:
دومین کنفرانس زیرساخت های انرژی،مهندسی برق و نانو فناوری (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:
محمدرضا گلی - *دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه گیلان، رشت، ایران*

رضا انصاری خلخالی - *دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه گیلان، رشت، ایران*

منصور درویزه - *دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه گیلان، رشت، ایران*

خلاصه مقاله:
در این تحقیق با استفاده از روش تیوری تابع چگالی به بررسی خواص الاستیک نانو ساختار صفحه ای سیلیسن تحت تاثیرجذب شیمیایی اتم هیدروژن به صورت نیمه هیدروژنه و تمام هیدروژنه پرداخته شده است. بدین منظور در ابتدا سلولواحد ساختار صفحه ای سیلیسن در نرم افزار سایستا، بهینه شده تا مناسبترین ابعاد سلول واحد، طول پیوند و زاویه پیوندبین اتم ها بدست آید، سپس با توجه به مفهوم انرژی کرنشی بر حسب میزان کرنش تک محوره و دومحوره در ناحیههارمونیک، مدول یانگ و مدول بالک نانو ساختار صفحه ای سیلیسن تحت تاثیر تاثیر جذب شیمیایی اتم هیدروژن بهصورت نیمه هیدروژنه و تمام هیدروژنه استخراج می گردد.

کلمات کلیدی:
تیوری تابع چگالی، نانو ساختار، انرژی کرنشی، خواص الاستیک، جذب شیمیایی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/781636