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

عنوان مقاله:
بررسی جذب سطحی در نانوکامپوزیت‌های گرافن/ اکسیدگرافن- پلیمرهای تقویت شده به‌روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی واکنشی

محل انتشار:
فصلنامه مواد پیشرفته در مهندسی, دوره 37, شماره 3 (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 23

نویسندگان:
گیتی پیشه ورز - ۱. *Faculty of Chemical and Petroleum Engineering, University of Tabriz, Tabriz, Iran.*

حمید عرفان نیا - ۱. *Faculty of Chemical and Petroleum Engineering, University of Tabriz, Tabriz, Iran.*

اسماعیل زمین پیما - ۲. *Department of Physics, Qazvin Branch, Islamic Azad University, Qazvin, Iran.*

خلاصه مقاله:
چکیده- در این پژوهش، میزان جذب سطحی پلیمرهای مزدوج بر گرافن/ اکسید گرافن به‌روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با میدان نیروی واکنشی مورد تحقیق قرار گرفت. پلیمرها عبارتند از پلی(3- هگزیل تیوفن) و پلی(فنوتیازین وینیلن)- پلی‌تیوفن. طول و عرض ورقه گرافنی به‌ترتیب برابر با 196/95 آنگستروم و 164/54 آنگستروم است. ورقه‌های اکسیدگرافن با درصدهای اکسیدشدگی متفاوت درنظر گرفته شدند. نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی میزان جذب سطحی بیشتری را روی ورقه‌های اکسید گرافن نسبت به ورقه گرافن نشان دادند؛ علاوه بر این پلی(فنوتیازین وینیلن)- پلی‌تیوفن میزان جذب سطحی بیشتری از پلی(3- هگزیل تیوفن) در بررسی با هر دو گروه عاملی هیدروکسی و اپوکسی نشان داده است. همچنین، برخی خواص ساختاری پلیمرها مانند شعاع چرخشی پلیمر و تابع توزیع شعاعی، در محل‌های واکنشی محاسبه شدند.

کلمات کلیدی:
Adsorption, Graphene, Graphene oxide, Conjugated polymer, Molecular Dynamics,.
جذب سطحی, گرافن, اکسید گرافن, پلیمر مزدوج, دینامیک مولکولی, میدان نیروی واکنشی.

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1155660