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

عنوان مقاله:

مطالعه انرژی انتروپی پلی (اتیلن ترفتالات) به روش شبیه سازی مولکولی

محل انتشار:

سیزدهمین کنفرانس ملی مهندسی نساجی ایران (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

زهرا مهدوی پور – دانشکده مهندسی نساجی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

محمد کریمی – دانشکده مهندسی نساجی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

خلاصه مقاله:

شبیه سازی دینامیک مولکولی روش محاسباتی رشدیافته ای برای درک رفتار سامانه های پیچیده پلیمری است که در آن می توان بسیاری از خواص میکروسکوپی و ساختاری پلیمر را که به روش تجربی قابل اندازه گیری نیست، محاسبه و خواص ماکروسکوپی آن را پیش بینی نمود. در این پژوهش، انرژی تعادلی یک سامانه پلیمری شامل یک تک زنجیر پلی(اتیلن ترفتالات) با ۱۰۰ واحد تکرارشونده در محدوده دمایی ۴۷۳-۳۲۳k بررسی شد. بر اساس روابط ترمودینامیکی، انرژی آزاد را می توان مجموع انرژی انتالپی و انتروپی دانست. ازاین رو تغییرات انرژی انتالپی و انتروپی در این بازه دمایی محاسبه شد. بر اساس نتایج شبیه سازی، انرژی کل سامانه و هریک از بخش های انتالپی و انتروپی، با افزایش دما افزایش می یابد. افزایش انرژی انتروپی با دما مرتبط با تغییرات پیکربندی زنجیره ها است. تغییرات فشار سامانه با افزایش دما نیز بررسی شد. تشابه آهنگ و رفتار تغییرات انرژی انتروپی و فشار نشان-دهنده ارتباط مستقیم نیروی حرارتی با انتروپی است؛ بنابراین می توان مطالعه نیروی حرارتی پلیمر را روشی دقیق جهت بررسی انتروپی و ریزساختار پلیمر دانست.

کلمات کلیدی:

پلی(اتیلن ترفتالات)، انرژی انتروپی، شبیه سازی دینامیک مولکولی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1954563