

عنوان مقاله:

بررسی ترمودینامیکی مشتقات حاصل از مونومر PVC با نانو ساختارهای هم جرم از فولرن، نانو تیوب و نانو مخروط در دمای اتاق، به روش DFT

محل انتشار:

اولین کنفرانس و نمایشگاه بین المللی فناوری های نوین در صنعت لاستیک و پلیمر (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

رویا احمدی - دانشیار، دکترای شیمی معدنی، عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهرری، تهران، ایران

طاہرہ بروشکی - دانشجوی دکتری شیمی آلی، عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره)، شهرری، تهران، ایران

مهدی عزتی - دانشجوی دکتری شیمی آلی، عضو باشگاه پژوهشگران جوان و نخبگان، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره)، شهرری، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

در این بررسی خواص ترمودینامیکی مشتقات مونومر پلی وینیل کلراید، PVC با نانو ساختارهای هم جرم از فولرن، نانو تیوب و نانو مخروط در دمای اتاق، به روش DFT، مورد مطالعه قرار گرفت. برای این منظور ابتدا مواد مورد نظر بهینه سازی هندسی شدند، سپس محاسبات مربوط به پارامترهای ترمودینامیکی بر روی همه آنها انجام شد. سپس روند تغییرات پارامترهای وابسته به انرژی از جمله ظرفیت گرمایی ویژه، آنتالپی، آنتروپی و انرژی آزاد گیبس نسبت به جرم مولکولی، حجم مولکول و سطح اندازه گیری شده در این تحقیق در دمای معین، نسبت به هم مورد ارزیابی قرار گرفت.

کلمات کلیدی:

لاتین-PVC، فولرنهای دارای کربن متفاوت، روش تیوری تابعی چگالی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/572449>

