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

عنوان مقاله:
پیش بینی تغییرات طول سکانس های مونومری و نوع کوپلیمر به روش مونت کارلو

محل انتشار:
دوازدهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران (سال: 1387)

تعداد صفحات اصل مقاله: 11

نویسندگان:
زهرا حسین زاده نیک - *دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه تهران*

یوسف محمدی - *گروه پژوهشی فناوری های نوین، شرکت پژوهش و فناوری پتروشیمی، شرکت ملی ص*

سید حسن جعفری - *دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه تهران*

وحید حدادی اصل - *دانشکده مهندسی پلیمر، دانشگاه صنعتی امیرکبیر*

خلاصه مقاله:
در این تحقیق پیش بینی تغییرات طول سکانس های مونومری و نوع کوپلیمر در حین سنتز در فرایند کوپلیمریزاسیون رادیکال آزاد در جهت بهینه سازی و دستیابی به خواص مطلوب آن با به کارگیری روش شبیه سازی مونت کارلو صورت پذیرفته است. در این راستا اثر تغییرات نسبت خوراک بر روی عوامل تعیین کننده ساختار ماکرومولکول ها در مدل مورد نظر مورد مطالعه قرار گرفته است. برای این منظور تغییرات کسر مونومر A موجود در زنجیرهای کوپلیمری (FA) و متوسط عددی وزن مولکولی سکان سهای مونومری (Mn) به عنوان توابعی از درصد تبدیل گزارش شد هاند. از سوی دیگر برای تعیین نوع کوپلیمر سنتز شده در هر لحظه، تغییرات پارامتر راندمنس (fAB) برحسب درصد تبدیل لحاظ شده است. در انتها درصد انواع زنجیرهای ماکرومولکولی موجود در محصول پایانی محاسبه شده است. بررسی نتایج حاصل از این مدل تعیین بهترین درصد تبدیل و بهترین خوراک برای رسیدن به ساختار کوپلیمری مطلوب را میسر می سازد.

کلمات کلیدی:
کوپلیمریزاسیون، شبیه سازی مونت کارلو، متوسط عددی وزن مولکولی، سکانس های مونومری

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/58184