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

عنوان مقاله:
مطالعه رفتار زنجیر پلی (2-اتیل- 2-اکسازولین) در مجاورت نانوصفحه گرافن عاملیت دار شده با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی

محل انتشار:
ششمین کنفرانس ملی پژوهش های نوین در علوم و مهندسی شیمی (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:
سمیرا فروتن - *دانشگاه صنعتی اصفهان*

احمد اسدی نژاد - *هییت علمی دانشگاه صنعتی اصفهان*

خلاصه مقاله:
پلیمرهای تقویت شده با نانو ذرات با هدف بهبود خواص پلیمر و افزایش قابلیت کاربرد آنها در زمینه های مختلف طراحی شده اند و به علت خواصی که در هر دو جنبه ی علمی و صنعتی داشته اند بسیار مورد توجه قرار گرفته اند، با این وجود از نظر تجربی چالش های بزرگی برای تهیه و شناسایی ساختار نانو کامپوزیت های پلیمری وجود دارد. از این رو شبیه سازی های مولکولی سهم مهمی در پیش بینی و طراحی خواص و تعیین مشخصات آنها ایفا می کند و مسیر روشنی را در زمینه ی تحقیقات آزمایشگاهی فراهم می کند. افزودن نانو ذرات به یک ماتریس پلیمری می تواند خواص الکتریکی ، ریولوژی و ترییولوژی آن را بهبود بخشد و باعث تغییر شکل زنجیر پلیمر شود و برهمکنش بین نانو ذرات و پلیمر و سایز نانوذرات و بار گزاری نانو ذرات روی این تغییر شکل تاثیر می گذارد. در این تحقیق برهمکنش بین زنجیر پلی(2- اتیل 2- اکسازولین) و نانونو صفحه گرافن عاملیت دار توسط شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت و با توجه به نمودارهای انرژی و شعاع چرخش، نشان داده شد که طول زنجیر و دمای سامانه در رفتار پلیمر تاثیر داشته و همچنین اسکلت بندی زنجیر پلیمر (انعطاف پذیر) باعث تغییر نوع صورتبندی در سطح مشترک با فاز تقویت کننده می شود.

کلمات کلیدی:
شبیه سازی های مولکولی، نانو صفحه گرافن، پلی (2- اتیل 2- اکسازولین)، صورتبندی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/849037