

عنوان مقاله:

بررسی عامل دار کردن MOF ها برای افزایش ظرفیت جذب CO2

محل انتشار:

ششمین کنفرانس بین المللی شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسنده:

پوریا زرشناس - گروه شیمی معدنی، دانشکده علوم شیمی و نفت، دانشگاه شهید بهشتی

خلاصه مقاله:

در این پژوهش براساس مطالعات محاسباتی، با هدف بهبود ظرفیت جذب CO2 از مواد، چارچوب های آلی فلزی جدیدی را ارائه می کنیم، که در آن لیگاندهای پل توسط جایگزین های مختلفی عامل دار شده اند. انتخاب مواد بر اساس اندازه منافذ MIL-53 و دارای گروه های عاملی زیر هستند: OH، COOH، NH2 و CH3. برای تست هرصورت از گروه های عاملی، گرما و ایزوترم های جذب با استفاده از روش مشهور Grand Canonical Monte Carlo شبیه سازی می شوند که با محاسبات DFT مطابقت دارد. این مطالعه تاثیر بالای گروه های عاملی در افزایش جذب CO2 در محدوده فشار 0.01 تا 0.5 Bar و در دمای اتاق نشان می دهد.

کلمات کلیدی:

جذب CO2، MOF، جایگزینی لیگاند

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1005757>

