

عنوان مقاله:

شبیه سازی دینامیک مولکولی جداسازی مخلوط آب- استون توسط نانولوله های کربنی و بررسی تأثیر اندازه نانولوله ها و فشار هیدرواستاتیک اعمالی در روند جداسازی

محل انتشار:

مجله آب و فاضلاب، دوره 31، شماره 4 (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 13

نویسنده:

جعفر عظمت - استادیار، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه فرهنگیان، تهران، ایران

خلاصه مقاله:

در بسیاری از فرایندهای صنعتی، حلال استون به نسبت های مختلف با آب مخلوط می شود و جداسازی این مخلوط ها بدون صرف هزینه و انرژی زیاد ممکن نیست. امروزه پژوهشگران در پی یافتن روش هایی هستند که بدون صرف انرژی زیاد، امکان جداسازی کامل تر و بهتر حلال ها فراهم شود. لذا با توجه به اهمیت فرایندهای جداسازی حلال های مختلف از همدیگر و استفاده دوباره از آنها در صنعت، در این پژوهش برای اولین بار شبیه سازی دینامیک مولکولی جداسازی مخلوط آب- استون با استفاده از نانولوله های کربنی صندلی شکل انجام شد. به منظور جداسازی مخلوط آب- استون نانولوله های کربنی صندلی شکل با کایرالیته (5,5) و (6,6) استفاده شد که در واقع نانولوله های کربنی به عنوان فیلتر جداکننده برای مخلوط آب- استون عمل کردند. برای این منظور از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی استفاده شد. همچنین فشار هیدرواستاتیک، به عنوان یک نیروی خارجی، به سیستم مورد نظر اعمال شد تا گونه های موجود در سیستم با عبور انتخاب پذیر از داخل نانولوله ها از همدیگر جدا شوند. نتایج شبیه سازی نشان داد که با تغییر نوع نانولوله، فرایند جداسازی این مخلوط، رفتار متفاوتی نشان می دهد، به طوری که با استفاده از نانولوله های کربنی (5,5) با قطر کوچک تر، جداسازی کامل این مخلوط انجام شد، در حالی که در حضور نانولوله های کربنی (6,6) با قطر بزرگ تر، جداسازی به صورت کامل انجام نشد و از هر دو حلال به نسبت های مختلف از این نوع نانولوله عبور کردند که مطلوب نبود. برای درک بهتر نتایج و تفسیر آنها، برخی آنالیزها شامل مقدار عبوری مولکول های آب و استون، پروفایل دانسیته، پتانسیل نیروی میانگین، زمان بازداری و پیوندهای هیدروژنی بین گونه های سیستم نیز استخراج شد. با توجه به نتایج این پژوهش، از نانولوله های کربنی با قطر مناسب برای جداسازی برخی مخلوط های آبی از جمله مخلوط آب- استون می توان استفاده کرد و به گونه های خالص هر یک از حلال ها دست یافت که این امر باعث استفاده مجدد از آنها و صرفه جویی در هزینه ها خواهد شد.

کلمات کلیدی:

شبیه سازی دینامیک مولکولی، نانولوله کربنی، آب، استون، پتانسیل نیروی متوسط، جداسازی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1123803>

