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

عنوان مقاله:

مطالعه شبیه سازی دینامیک مولکولی جداسازی انتخابی گاز CO۲ از N۲ به وسیله ی غشای گرافتریینی: مدلی برای تصفیه گاز خروجی دودکش

محل انتشار:

مجله شیمی کاربردی روز, دوره 17, شماره 64 (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 18

نویسندگان:

زهرا کلانتر – دانشکده شیمی– دانشگاه صنعتی شاهرود– شاهرود– ایران

یسرا دلشاد – گروه شیمی– دانشکده علوم– دانشگاه کردستان– سنندج– ایران

سید مجید هاشمیان زاده – تهران– دانشگاه علم وصنعت– دانشکده شیمی– آزمایشگاه تحقیقاتی شبیه سازی مولکولی

خلاصه مقاله:

چکیدهدر این کار توانایی جداسازی انتخابی گازهای CO۲ از N۲ با ترکیبی مشابه گاز دودکش به وسیله غشای سه لایه گرافتریینی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مطالعه گردید. برای این منظور، از دو مجموعه NPT و NVT استفاده شد. در مجموعه NPT ، مولکولهای گاز در دو طرف غشا و در مجموعه NVT ، مولکولهای گاز در یک طرف غشا قرار گرفتند. سپس، اثر دما و فشارهای مختلف در مجموعه NPT و اثر دما و فشارهای اولیه مختلف در مجموعه NVT، روی توانایی غشا برای جداسازی CO۲ از N۲ مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد با وجودی که سایز حفره‌های گرافتریین به اندازه کافی برای عبور این مولکول‌ها بزرگ هستند اما در هر دو مجموعه، مولکول‌های CO۲ بیشتر بین لایه های گرافتریین جذب شده–اند. همچنین مشخص شد با افزایش دما جذب مولکول‌های N۲ نسبت به CO۲ کاهش بیشتری یافته، در نتیجه انتخاب پذیری جذب CO۲ نسبت به N۲ افزایش می‌یابد. با افزایش فشار، اگرچه درصد عبور مولکول‌های CO۲ به دام افتاده از بین لایه ها افزایش می یابد اما کماکان غشا، انتخاب پذیری جذب CO۲ نسبت به N۲ را حفظ می کند. بنابراین، می توان غشای سه لایه ی گرافتریینی را برای جذب و جداسازی CO۲ از N۲ بسیار مناسب و کارآمد معرفی کرد.

کلمات کلیدی:

گرافتریین, شبیه سازی دینامیک مولکولی, جداسازی CO۲

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/2074407