

عنوان مقاله:

بررسی جذب فیزیکی گازهای سولفید هیدروژن و کربن دی اکسید بر روی نانولوله های کربنی تک دیواره آلاییده شده با نیتروژن برای شیرین سازی گازهای طبیعی ترش به روش DFT

محل انتشار:

اولین همایش ملی فناوری های نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 11

نویسندگان:

مرتضی رضایی سادات - کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

محسن افتاده - دانشیار دانشگاه پیام نوا صفهان

علیمراد رشیدی - دانشیار پژوهشگاه صنعت نفت

خلاصه مقاله:

در این مقاله بررسی جذب فیزیکی گازهای سولفید هیدروژن و کربن دی اکسید بر روی نانولوله کربنی زیگزاگ 5 و 0 آلاییده با نیتروژن به کمک روش نظریه تابعیت چگال و سطح نظری B3LYP با بکارگیری مجموعه پایه متوسط G31-6 توسط نرم افزار گوسین مورد توجه قرار گرفته است کاربرد این تحقیق برای بدست آوردن نانولوله کربنی مناسب جهت کاهش مراحل فراورش گازهای طبیعی خام در جذب گازهای ترش و همچنین کاهش هزینه های زیاد بازیافت محلولهای آمینی می باشد پس از بررسی ساختارهای مختلف نانولوله کربنی آلاییده با نیتروژن از نظر پایداری و فراوانی و انتخاب ساختار مناسب برهمکنش گازهای ترش در موقعیت های مختلف با در نظر گرفتن چرخش مولکول گازی در دیواره خارج یو داخلی مورد بررسی قرار گرفت خصوصیات نظیر تصحیح انرژی جذب گاف انرژی ممان دوقطبی توزیع بار الکتریکی رسانایی و سدانرژی علاوه بر پارامتر اصلی مورد نظر که همان انرژی جذب گازها روی نانولوله کربنی آلاییده با نیتروژن می باشد حاصل گردید

کلمات کلیدی:

نانولوله های کربنی تک دیواره آلاییده شده با نیتروژن، نظریه تابعیت چگال، گازهای طبیعی ترش

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/211958>

