

عنوان مقاله:

کاربرد مایعات یونی بر پایه تترازولیوم در جداسازی ترکیبات حلقوی گوگردی

محل انتشار:

چهارمین کنفرانس بین المللی برنامه ریزی و مدیریت محیط زیست (سال: 1396)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

حسین روحی - استاددانشگاه گیلان

نرجس پورقاسمی - دانشجوکارشناسی ارشددانشگاه گیلان

خلاصه مقاله:

اخیرا جدا سازی ترکیبات آروماتیک گوگرددار با استفاده از مایعات یونی مورد توجه قرار گرفته است. مایعات یونی نسبت به حلال های آلی رایج فشار بخار ناچیز دارند و به عنوان حلال سبز دوست دار محیط زیست هستند. بنابراین در این کار جداسازی تیوفن، دی بنزو تیوفن و دی فنیل سولفید با مایع یونی 1- اتیل-3- متیل تترازولیوم تترا فلورو بورات ([EMTT][BF₄]) مورد مطالعه قرار گرفته است و از شیمی محاسباتی و نظریه تابع چگالی در سطح نظری (M06-2X/6-311++G(d,p) استفاده شده است. تحلیل اوربیتال پیوند طبیعی (NBO) و نظریه کوانتومی اتم ها در مولکول (AIM) برای ارزیابی ماهیت برهمکنش بین مایع یونی [EMTT][BF₄] و تیوفن، دی بنزو تیوفن و دی فنیل سولفید درکمپلکس های A، B و C استفاده شده است. نتایج نشان می دهد کاتیون و آنیون سازنده این مایع یونی نقش مهمی در فرایند استخراج و جداسازی ترکیبات آروماتیک گوگرددار دارند. مقادیر انرژی برهمکنش بین مایع یونی و ترکیبات گوگردی در این کمپلکس ها به ترتیب $B > A > C$ می باشد. تجزیه و تحلیل بارها نشان می دهد که در طی این فرایند انتقال بار بین ترکیبات گوگردی و مایع یونی رخ می دهد. داده های AIM وجود پیوند هیدروژنی بین اجزاء کمپلکس را تایید می کند.

کلمات کلیدی:

مایعات یونی، جداسازی، نظریه تابعی چگالی، پیوند هیدروژنی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/589947>

