

عنوان مقاله:

بررسی گروه‌های عاملی مختلف در جهت افزایش میزان جذب و ضریب نفوذ CO₂ در ساختار متخلخل آلی-فلزی-زیولیتی (8-ZIF-8)

محل انتشار:

سومین کنفرانس انتقال حرارت و جرم ایران (سال: 1396)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

فاطمه مهاجر - گروه مهندسی شیمی، دانشگاه مهندسی فناوری نوین قوچان، قوچان، ایران،

مهدی نیکنام شاهرک - گروه مهندسی شیمی، دانشگاه مهندسی فناوری نوین قوچان، قوچان، ایران،

خلاصه مقاله:

امروزه تولید روزافزون گاز دی اکسید کربن و انتشار آن به جو زمین و اثرات مخرب زیست محیطی آن، جلوگیری از انتشار این گاز به جو زمین به دغدغه اصلی دانشمندان و علاقمندان به محیط زیست تبدیل شده است. از یک طرف ایجاد خسارتهای زیست محیطی و از طرف دیگر مشکلاتی که وجود این گاز در گاز طبیعی به وجود می‌آورد، باعث شده بحث حذف دی اکسید کربن به موضوعی مهم و حیاتی تبدیل شود. از جمله مشکلات حضور این گاز در گاز طبیعی میتوان به کاهش ارزش حرارتی گاز و همچنین خاصیت اسیدی دی اکسید کربن در حضور آب که سبب افزایش خوردگی خطوط پالایش و انتقال گاز میشود اشاره کرد. در این مقاله با استفاده از شبیه سازی مولکولی، میزان جذب دی اکسید کربن در یکی از جاذبهای خانواده بزرگ MOF ها به نام ZIF-8 مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین اثر گروههای عاملی بر میزان ظرفیت جذب CO₂ در شرایط دمایی K 298 از طریق شبیه سازی مولکولی بررسی شد. نتایج نشان داد که از بین گروههای عاملی بررسی شده لیتیم بیشترین ضریب نفوذ و همچنین بیشترین اثر را بر افزایش میزان جذب دی اکسید کربن دارد.

کلمات کلیدی:

شبیه سازی مولکولی، چارچوب فلزی-آلی-زیولیتی-8، گروههای عاملی، جذب و جداسازی دی اکسید کربن

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/698817>

