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

عنوان مقاله:
مدل سازی جذب کاتیون فلزی با آلفا، بتا و گاما سیکلودکسترین

محل انتشار:
اولین کنفرانس ملی مدلسازی در مهندسی معدن (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:
غلامحسین نورمحمدی - *دانشجوی دکتری مهندسی معدن، دانشگاه صنعتی تبریز سهند*

لیلی حیدرپور صارمی - *دانشجوی دکتری شیمی، دانشگاه سیستان و بلوچستان*

علی ابراهیمی - *استاد، دانشگاه سیستان و بلوچستان*

غلامرضا کریمی - *استادیار، دانشگاه بین المللی امام خمینی قزوین*

خلاصه مقاله:
ترکیبات فراوانی حاوی سیکلودکسترین به دلیل ویژگی های منحصر به فرد خود قادر به زدودن محدوده وسیعی از آلودگی های موجود در آب و پساب ها مانند فلزات و رنگ ها هستند. سیکلودکسترین ها با توجه به تعداد واحدهای گلوکزی تشکیل دهنده خود 6، 7، 8 واحد، به ترتیب به سه دسته آلفا، بتا و گاما سیکلودکسترین طبقه بندی می شوند. این ترکیبات حلقوی دارای دو سطح آبدوست و آبگریز برای به دام انداختن ترکیبات با قطبیت های مختلف است. رفتار دوگانه سیکلو دکسترین ها باعث جذابیت آنها در زمینه های مختلف صنعتی از جمله داروسازی، پزشکی و آرایشی شده است. کاتیون های فلزی یکی از منابع آلودگی پساب های معدنی و صنعتی هستند که فرآیند حذف این ترکیبات می تواند موضوع جالبی برای مطالعه باشد. در این کار، آنالیز تئوری برهمکنش کاتیون فلزی 1+(Cu) با آلفا، بتا و گاما سیکلودکسترین مورد مطالعه قرار گرفته است. ساختار و انرژی های پایداری این ترکیبات با استفاده از نظریه دانسیته الکترونی DFT و روش B3LYP همراه با مجموعه پایه 31g(d,p-6) در فاز گازی و محلول بررسی شده است. نتایج بدست آمده نشان داد که آلفا و بتا سیکلودکسترین به ترتیب تمایل بیشتری برای برهمکنش با کاتیون 1)Cu+) در فاز گازی و آبی داشته و بنابراین نامزدهای احتمالی برای زدودن این یون از پساب های صنعتی است.

کلمات کلیدی:
سیکلودکسترین، کاتیون فلزی.

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/860617