



چهارمین همایش شیمی، مهندسی شیمی و نانو ایران، دانشگاه تهران

جذب آمونیاک و آب روی زئولیت 4A-5A با استفاده از شبیه سازی ملکولی

احمد ملایی¹، دانیال لطفی مقدم²

¹گروه مهندسی شیمی، دانشگاه امام حسین (ع)، ایران، a.mollaei@merc.ac.ir

²گروه مهندسی شیمی، دانشگاه امام حسین (ع)، ایران، lotfi.dani70@yahoo.com

چکیده

این پژوهش با استفاده از شبیه سازی مونت کارلو انجام شده است. مونت کارلو یک روش تصادفی و متکی بر پایه احتمالات است. زئولیت ها مواد جامد کریستالی نانو متخلخل با منافذ یکنواخت و در محدوده 0.2 - 0.3 نانومتر با داشتن ساختار سفت سخت تعریف شده است، جذب گاز آمونیاک و بخار آب با استفاده از زئولیت LTA مورد بررسی قرار گرفته است. زئولیت LTA شبیه سازی شده شامل 96 سیلیکات، 96 آلومینیوم و 384 اتم اکسیژن است و شامل 8 سلول می باشد که به صورت سه بعدی در نظر گرفته شده است. بررسی ایزوترم جذب NH_3 و H_2O از این میدان نیرو Compass استفاده می شود اثر فشار و دما بر میزان جذب بررسی شده و نتایج حاصل از شبیه سازی با داده های آزمایشگاهی موجود در مراجع مقایسه شده است. در دمای ثابت، افزایش فشار باعث افزایش در جذب می شود و با افزایش فشار اثر فشار در جذب کمتر می شود، نتایج نشان می دهد که تاثیر سطح و فضای داخلی زئولیت ها بر مقدار جذب به اندازه تاثیر دما و فشار است.

کلمات کلیدی: زئولیت 4A-5A، شبیه سازی مونت کارلو، جذب

ABSORPTION AMMONIA AND WATER ON ZEOLITE 4A-5A USING MOLECULAR SIMULATION

ABSTRACT

This research was conducted using Monte Carlo simulation. Monte Carlo random sampling and based on a probability basis. Nanoporous zeolites, crystalline solids with uniform pores in the range of 0.2 to 0.3 nm with a hard stiff structure is defined, Absorption of ammonia gas and water vapor is studied using zeolite LTA. LTA zeolite simulated silicate 96, 96 aluminum and oxygen atoms 384 And includes 8 cells, which is considered to be three-dimensional. study isotherm adsorption NH_3 and H_2O of this force field is used Compass; The effect of pressure and temperature on the adsorption were investigated and the results of the simulation were compared with existing experimental data. At constant temperature, pressure increases in absorbed And Increasing pressure effect of pressure in absorption decreases, The results show that the impact on the absorption of the zeolite surface and interior space as the influence of temperature and pressure.

Keywords:

Zeolite 4A-5A, Monte Carlo, absorption

1- مقدمه

سوخت فسیلی بیش از 98 درصد از نیازهای انرژی در جهان را تامین می کند، با این حال احتراق سوخت های فسیلی یکی از منابع عمده

* lotfi.dani70@yahoo.com