



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

جذب گاز کربن دی اکسید روی زئولیت 4A-5A با استفاده از شبیه سازی مولکولی

احمد ملایی^۱، سعید پورمند^۲، دانیال لطفی مقدم^{۳*}، محمد پورمند^۴، منا خدایی پور^۵

^۱ گروه مهندسی شیمی، دانشگاه امام حسین(ع)، ایران، a.mollaei@merc.ac.ir

^۲ گروه مهندسی شیمی، دانشگاه تبریز، ایران، saeed_poormand@yahoo.com

^۳ گروه مهندسی شیمی، دانشگاه امام حسین(ع)، ایران، lotfi.dani70@yahoo.com

^۴ گروه مهندسی شیمی، واحد ماهشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، ماهشهر، ایران، mohamad_poormand@yahoo.com

^۵ گروه مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی سهند تبریز، ایران، m.khodaei_68@yahoo.com

چکیده

زئولیت‌ها به عنوان یک جاذب ایده‌آل برای حذف آلاینده‌ها در نظر گرفته می‌شوند، زیرا دارای ظرفیت بارگیری مناسب و ساختار پایدار هستند. در این تحقیق با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی جذب گاز دی اکسید کربن استفاده از زئولیت LTA(5A-4A) مورد بررسی قرار گرفته است. زئولیت LTA شبیه‌سازی شده شامل ۹۶ سیلیکات، ۹۶ آلومینیوم و ۳۸۴ اتم اکسیژن است که به صورت سه بعدی در نظر گرفته شده است. پتانسیل استفاده شده در این کار شامل کولمبیک، لnard جونز و باکینگهام است و اثرات آن بر شبیه‌سازی مورد بررسی قرار گرفته، علاوه بر این اثر فشار و دما بر میزان جذب بررسی شده و نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی موجود در مراجع مقایسه شده است، نتایج شبیه‌سازی انجام گرفته روی زئولیت‌ها نشان می‌دهد.

کلمات کلیدی

زئولیت (4A-5A) LTA، شبیه‌سازی مولکولی، جذب سطحی.

ahmad mollaei , denial lotfi moghadm , mona khodaei pour, Said Purmand, Mohammad Purmand

ABSTRACT

Zeolite as an adsorbent to remove contaminants are considered ideal because it has a good load capacity and stable structure. In this study, using molecular simulation absorb carbon dioxide using zeolite LTA (5A-4A) is studied. Zeolite as an adsorbent to remove contaminants are considered ideal because it has a good load capacity and stable structure. In this study, using molecular simulation absorb carbon dioxide using zeolite LTA (5A-4A) is studied.

KEYWORDS:

Hydrogen , Nanozeolite , absorption , Monte Carlo simulation

* lotfi.dani70@yahoo.com