پیش بینی انرژی آزاد حلالیت تتراهیدروکسی تترامتیل بیس ایندان و تترافلوئورو ترفتالونیتریل در سیال فوق بحرانی دی اکسید کربن به روش شبیه سازی دینامیکی- مولکولی

نیلوفرسعادت کیش [۱]، جواد کریمی ثابت [۲*]، علیرضا شریف [۱*]

۱- گروه مهندسی پلیمریزاسیون، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

۲- پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، تهران، ایران

خلاصه

حلالیت ترکیبات آلی در سیالات فوق بحرانی، راهکاری مهم و دوستدار محیط زیست برای سنتز ترکیبات جدید به شمار می رود. کیفیت و کمیت حلالیت، به شدت تحت تأثیر متغیرهای فرآیندی سیال مانند دما و فشار است. این موضوع، انتخاب شرایط بهینه فرآیندی را به یکی از موضوعات مهم در سنتز مواد آلی در محیط سیالات فوق بحرانی تبدیل می کند. مطالعه حاضر، با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی تأثیر متغیرهای فرآیندی سیال فوق بحرانی، شامل دما و فشار را بر انرژی آزاد حلالیت مورد بررسی قرار می دهد. در این تحقیق، انرژی آزاد حلالیت مونومرهای تتراهیدروکسی ترامتیل بیس ایندان و تترافلوئورو ترفتالونیتریل ، از جمله پرکاربردترین مونومرها در سنتز پلیمرهای نوین و با ارزش برخوردار از میکرومتخلخل های ذاتی (PIM)، در سیال فوق بحرانی دی اکسید کربن مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که هر دو مونومر فوق الذکر در دمای ۹۰° C و فشار ۱۲۰ bar به اندازه کافی در بستر دی اکسیدکربن فوق بحرانی محلول بوده و دارای قابلیت واکنش با یکدیگر برای تولید پلیمری با جرم مولکولی مناسب هستند.

کلمات کلیدی: انرژی آزاد حلالیت، سیال فوق بحرانی دی اکسید کربن، شبیه سازی دینامیک- مولکولی.

۱. مقدمه

حلالیت در سیالات فوق بحرانی با تغییر پارامترهای حالت نظیر دما و فشار قابل تنظیم است[۱]. این ویژگی موجب شده است که سیالات مذکور با وجود نیاز به نصب تجهیزات فشار بالا، کاربرد قابل ملاحظه ای در سنتز پلیمرها داشته باشند.

در میان سیالات فوق بحرانی، سیال فوق بحرانی دی اکسید کربن[†] ($sc\text{-}CO_2$) به دلایلی نظیر دمای بحرانی پایین، سمیت کم و قدرت حلالیت نسبتاً بالا به یکی از پرکاربردترین سیالات فوق بحرانی در سنتز پلیمرها و سایر ترکیبات آلی تبدیل شده است[۲, ۳]. سیالات فوق بحرانی مانند گاز درون ساختار ترکیبات نفوذ کرده و مانند مایعات آنها را در خود

* **Emails: javad.karimisabet@gmail.com , asharif@modares.ac.ir**

† **Supercritical CO_2**