

عنوان مقاله:

بررسی سنتز و ساخت و شبیه سازی دینامیک مولکولی غشاء نانوفیلتراسیون بهبود یافته با نانوزئولیت ها: انتخاب پذیری مولکول های میهمان، پایداری

محل انتشار:

اولین همایش بین المللی علوم و فناوری نانو (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 11

نویسنده:

علی لشنی زند - کارشناسی ارشد، مهندسی شیمی (گرایش نانوفناوری)، دانشکده فنی مهندسی، جهاد دانشگاهی اصفهان

خلاصه مقاله:

غشاء نانوفیلتراسیون جزو آخرین ابداعات در زمینه ی فیلتراسیون هستند و عمدتاً برای گند زایی و حذف املاح از آبهای سطحی و یازیرزمینی بکار میروند. در این نوع غشاءها، مولکولهای کوچک به راحتی اجازه ی عبور دارند و مولکولهای دیگر در طرف دیگرغشاء باقی میمانند. به طور معمول در این نوع غشاء آب حلال و یون های معمول می توانند عبور کنند. در آب شرب املاح ضروری برای زندگی موجودات زنده وجود دارد و نیاز نیست که این مواد بطور کامل از آن حذف شوند همچنین خطر وجود فلزات سنگین و چند جزئی در آب شرب، ایده ی تولید نانوفیلترهای انتخابپذیر را بوجود می آورد. در این کار قصد داریم دو گروه از نانوفیلترهای سرامیکی و پلیمری را با استفاده از چارچوب ایمیدازولات زئولیت- 8 گزینشپذیر نماییم. گزارش هایی در مورد پایداری ترمودینامیکی و ویسکوالاستیکی در سه بعد فضایی نانومتخلخل و ترکیب پذیری با غشاء نوع سرامیکی و پلیمری ارائه شده است. در این مطالعه، شبیهسازیهای دینامیک مولکولی صورت گرفته در گزارشهای پیشین و شناسایی عملکرد جذب آرسنیک و میدان نیرو با توجه به مدل لانگمویر در مقیاس مولکولی بیان میگردد. همچنین مدل مولکولی چارچوب ایمیدازولات زئولیت و مولکولهای میهمان در این ساختار بر اساس تئوری تابع چگالی تشریح می گردد.

کلمات کلیدی:

نانوفیلتراسیون، چارچوب ایمیدازولات زئولیت، پایداری ترمودینامیکی، ویسکوالاستیکی، شبیه سازی دینامیک مولکولی، تئوری تابع چگالی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1140989>

