



شیمی و مهندسی شیمی

تهران - بهمن ۱۳۹۷

مطالعه نظری جذب مولکول کربن دی اکسید و مکانیسم شکستن آن روی

نانو خوشه فلزی Ni_4Mo

عبدالحکیم پنق^{۱*}، علیرضا حنفی^۲، مهدی قائمی^۳

۱- استادیار شیمی - عضو هیات علمی دانشگاه فرهنگیان - پردیس شهید بهشتی مشهد

۲- دانشجوی دکترای شیمی فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد قائمشهر

۳- دانشیار گروه شیمی - دانشکده علوم- دانشگاه گلستان- گرگان

چکیده

در این پروژه فرایند جذب و شکستن مولکول کربن دی اکسید بر روی نانو خوشه های آلیاژی Ni_4Mo از طریق نظریه تابعیت چگالی بررسی شد نتایج نشان داد که مولکول کربن دی اکسید در حالتی که اتم کربن به اتم مولیبدن متصل شود و به هنگام شکستن بهر دو قسمت روی اتم مولیبدن متصل بماند هم از لحاظ سینتیکی و هم از لحاظ ترمودینامیکی مساعد می باشد. بررسی چگالی های الکترونی بعد از جذب مولکول روی خوشه فلزی نشان می دهد که چگالی الکترونی بین اتم مولیبدن و اتم کربن زیاد شده که نشان دهنده برهمکنش قوی بین مولکول و خوشه فلزی می باشد. بررسی بارهای اتمی NBO نشان می دهد که اتم مولیبدن از مولکول الکترون می گیرد و اتم نیکل به مولکول کربن دی اکسید الکترون می دهد.

کلمات کلیدی: نانو خوشه فلزی؛ انرژی جذب؛ کربن دی اکسید؛ نظریه تابعیت چگالی؛ بررسی سینتیکی

۱-مقدمه

نانوذرات فلزی و غیر فلزی در دهه های اخیر مورد توجه محققان زیادی قرار گرفته است. خواص این نانو ذرات با اندازه ذرات، ترکیب اتمی و همچنین شکل هندسی آنها تغییر میکنند. تبدیل فوتو کاتالیزوری CO_2 به سوخت ها بدلیل اینکه هم مقدار CO_2 و هم به عنوان یک راهی برای تولید انرژی تجدید پذیر است مورد توجه و مطالعه قرار گرفته است. سه روش برای کاهش مقدار گازهای گلخانه ای کربن دی اکسید مورد توجه دانشمندان قرار گرفته است: (۱) تجزیه و شکستن مولکولهای کربن دی اکسید و جذب آن روی سطح جاذب و سپس دفن آن مانند آنچه برای زباله های هسته ای انجام میشود (۲) جذب شیمیایی روی برخی فلزات اکسیدی که تبدیل به کربناتهای فلزی شده و اثرات گلخانه ای آن برطرف می شود. (۳) تبدیل آن به سوختهای قابل تجدید پذیر قابل استفاده. مین^[1] و همکارانش جذب مولکول کربن دی اکسید بصوت تکی، دوتایی و سه تایی بر روی نانو خوشه لوله ای Rh_2B_{18} بررسی کرده است. نتایج حاصل جذب قوی به همراه شکستن مولکول کربن دی اکسید مشاهده شده است. در یک مورد دیگر مطالعه نظری برهمکنش مولکول کربن دی اکسید با محلول آبی با ساختارهای آمینی جهت جذب کربن دی اکسید از هوا و تبدیل آن به کربناتها و کارباماتها بررسی شده است که نتایج نشان داده که کارباماتها محصول پایدارتری بوده است [2]. برهمکنش این مولکول با ترکیبات فلزی اکسیدی مانند منیزیم اکسید

* Corresponding author E-mail: hakimpangh@yahoo.com

[†] minh