



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده مهندسی مواد

بررسی محاسباتی جذب سطحی دی اکسید کربن توسط نانولوله کربنی با استفاده از نظریه تابعی چگالی

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی مواد- شناسایی و انتخاب مواد

ارائه کننده: مهرپویا جاودانی گندمانی

مکان: سالن سمینار دانشکده مهندسی مواد

زمان: شنبه ۴ مهر ۱۴۰۵ ساعت ۱۵:۳۰

اعضای کمیته داوری:

اساتید راهتما: دکتر مسعود پنجه پور، دکتر محمود مراتیان

اساتید داو: دکتر سید جواد هاشمی فر، دکتر اسماعیل عبدالحسینی سارسی

چکیده:

در این پژوهش، به منظور بررسی و بهبود جذب سطحی دی اکسید کربن، رفتار ساختاری و الکترونی نانولوله های کربنی اصلاح شده با استفاده از محاسبات نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. ابتدا جذب CO_2 بر روی نانولوله کربنی خالص مطالعه شد که نتایج نشان دهنده برهم کنش ضعیف و غالب بودن جذب فیزیکی بود. سپس اثر عیوب ساختاری شامل تک جای خالی، دو جای خالی و استون-ولز بررسی شد که عیب تک جای خالی بیشترین بهبود را در جذب نشان داد. در ادامه، تأثیر آرایش با عناصر سبک شامل نیتروژن، فسفر، سیلیسیوم و آلومینیوم و همچنین فلزات واسطه نیکل، رودیوم، وانادیوم، تنگستن و رنیوم ارزیابی شد. نتایج نشان داد که آلومینیوم، تنگستن و رنیوم برهم کنش قوی تری با CO_2 ایجاد می کنند. در مرحله بعد، رشد و پایداری کلاسترهای فلزی نیکل، مس، نقره، طلا، پالادیوم و پلاتین با اندازه های یک تا شش اتم روی CNT بررسی شد و کلاسترهای پلاتین و مس عملکرد مناسبی در جذب CO_2 نشان دادند. در نهایت، کلاسترهای ۱۳ اتمی آهن، نیکل و پلاتین نیز بررسی شدند که نتایج، وابستگی قابل توجه رفتار جذب به نوع فلز و اندازه کلاستر را نشان داد. مجموعه یافته ها نشان می دهد که مهندسی ساختار و اصلاح سطح CNT می تواند نقش مؤثری در تقویت برهم کنش و فعال سازی CO_2 داشته باشد.

واژه های کلیدی: دی اکسید کربن، نانولوله کربنی، نظریه تابعی چگالی، عیوب ساختاری، آرایش، کلاسترهای فلزی، جذب سطحی.