بررسی تاثیر رطوبت موجود بر ظرفیت جذب دوتایی N_2/SO_2 در غربال های مولکولی 13X و 5A، نتایج تجربی، شبیه سازی و مدل سازی

سعیده تشرفی[۱]،عبدالله گلچوبی[۱]، حسین تقدیسیان[۱]،حسین فصاحت[۲] و اکرم حسین نیا[۱]

[۱] پژوهشکده محیط زیست و بیوتکنولوژی، پژوهشگاه صنعت نفت، تهران، ایران

[۲] دانشگاه صنعتی شریف، پردیس بین الملل، جزیره کیش

تاریخ دریافت: ۹ فروردین ۱۳۹۷، تاریخ اصلاح:۲۴ تیر ۱۳۹۷، تاریخ پذیرش: ۲۷ شهریور ۱۳۹۷

DOI: 10.22078/jpst.2018.3238.1517

چکیده

در این پژوهش، جذب مقادیر مختلف SO_2 بر روی غربال‌های ملکولی (زئولیت) 13X و5A بررسی و نتایج با مدل و شبیه‌سازی مولکولی مقایسه شد. آزمایش‌های اشباع جاذب در چهار غلظت مختلف ۲۵۰، ۵۰۰، ۷۵۰ و ۱۰۰۰ جزء در میلیون مورد بررسی قرار گرفت و مشاهده شد که با افزایش غلظت آلاینده زمان اشباع نیز افزایش می‌یابد. روش مونت کارلو جهت انجام شبیه‌سازی استفاده شد. علاوه بر این، در ساختار جاذب 13X، کاتیون‌های اضافی سدیم و در ساختار 5A کاتیون‌های سدیم و کلسیم مورد استفاده قرار گرفتند. به منظور ارزیابی اثر ملکول‌های آب موجود در ساختار زئولیت بر میزان جذب، تعداد مختلف ملکول‌های آب در ساختار آنها، حین شبیه‌سازی، مورد استفاده قرار گرفت. مقایسه نتایج شبیه‌سازی با نتایج تجربی نشان داد ضمن این که این نتایج با هم انطباق خوبی دارند، جاذب 13X در مقایسه با 5A عملکرد بهتری در جذب SO_2 دارد. زئولیت 13X با ۹۶ مولکول آب و 5A با ۹۹ مولکول آب، بهترین عملکرد را در مقایسه با نتایج تجربی نشان دادند. به منظور ارزیابی کاهش ظرفیت جاذب، بر اساس میزان جذب و نقطه شکست، از مدل‌های یان-نلسون و BDST استفاده شد. نتایج هر دو مدل نشان داد که ظرفیت جذب در 13X بیشتر بوده در حالی که در 5A زمان اشباع طولانی‌تر است.

کلید واژه: دی اکسید گوگرد، جذب، شبیه سازی مولکولی، زئولیت، 13X، 5A.

*Corresponding author:
E-mail: tasharrofi@ripi.ir