

بررسی جذب گاز کربن دی اکسید بر روی هتروبیالایر GBS2 با استفاده از نظریه تابعی چگال

شایان محمدزاده^{۱*}، سیفاله جلیلی^۲، آتنا پاکزادیان^۳

۱ و * - نویسنده مسئول: دانشجوی کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی،

رایانامه (shayan.mo2000@gmail.com)

۲ - استاد تمام، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، علوم پایه و خواجه نصیرالدین طوسی، رایانامه (sjalili@kntu.ac.ir)

۳ - پسادکتری، شیمی فیزیک، شیمی فیزیک، علوم پایه و خواجه نصیرالدین طوسی،

رایانامه (a.pakzadiyan@email.kntu.ac.ir)

واژگان کلیدی: نانومواد، نانوصفحات دوبعدی، نظریه تابعی چگال، جذب گاز

۱- مقدمه

موادی که یکی از ابعاد آن ها در محدوده ۱ تا ۱۰۰ نانومتر باشد را نانو مواد می نامیم. علاوه بر تعریفی که بر اساس اندازه ارائه می شود، تعریف دیگری نیز وجود دارد که به تاثیر اندازه مربوط می شود. (Buzea 2007; Cao 2004) طبق این تعریف، نانو مواد، موادی هستند که با کوچک شدن یکی از ابعادشان، خاصیت جدیدی از خود نشان بدهند. خاصیتی که در مقیاس بزرگ تر یا بالک، اثری از آن مشاهده نمی شود. (Roduner) نانومواد به صورت متفاوتی طبقه بندی می شوند که مهمترین طبقه بندی براساس ابعاد است که در (شکل ۱) نشان داده شده است.

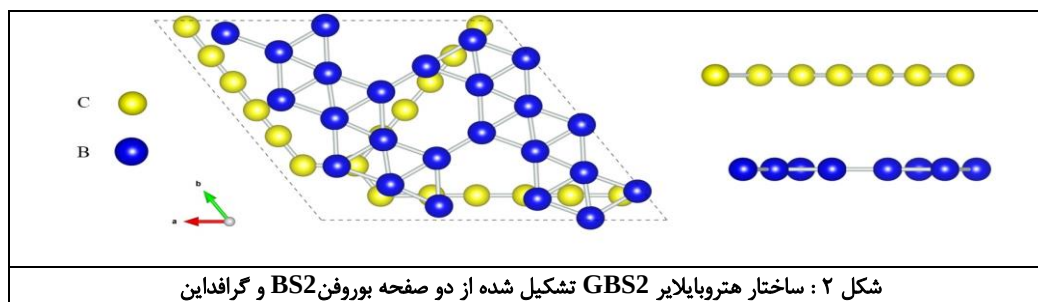


دنیای صنعتی امروز و پیشرفت های شگرفی که سبک زندگی انسان را تسهیل کرده است، اما بی تردید در حل مشکلات بشری دارای کاستی ها و چالش هایی است. همانطور که غلظت گاز کربن دی اکسید در جو با توسعه فعالیت های صنعتی افزایش یافته است. از سوی دیگر، به دلیل افزایش تقاضای انرژی، استفاده از سوخت های فسیلی چند برابر شده است. آلودگی ناشی از این گاز سلامت انسان را به طور جدی به خطر انداخته و باعث تغییرات آب و هوایی سریع شده است از این رو، حامیان و محققان محیط زیست برای حل این مشکلات تحقیقات زیادی انجام داده اند. یکی از رایج ترین راه حل ها، جذب گاز کربن دی اکسید و به دام انداختن آن توسط مواد دیگر است. (Oschatz 2018)

۲- بحث و روش

هتروبیالایرها، ساختارهای دو بعدی هستند که از دو تک لایه مختلف بدست می آیند؛ در آن ها تک لایه ها با خواص الکترونی متفاوت به یکدیگر متصل شده اند. در سال ۲۰۱۰، دین و همکارانش اولین ساختارهای ناهمسان نازک اتمی دو بعدی را معرفی کرد. هتروبیالایر شدن باعث ایجاد مواد جدید و ویژگی های جدید می شود که یکی از مهمترین ویژگی های الکترونی و

تفاوت مقدار گاف انرژی در ساختار نهایی نسبت به تک لایه‌های سازنده است. در این مقاله بررسی جذب گاز کربن دی اکسید بر روی هتروبیالایر GBS2 که توسط (Jalili and Pakzadiyan) معرفی شد؛ انجام گرفت.



شکل ۲: ساختار هتروبیالایر GBS2 تشکیل شده از دو صفحه بوروفن BS2 و گرافداین

تمام محاسبات این پژوهش در قالب روش تئوری تابعی چگالی با کمک از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو انجام شده و به منظور بسط تابع موج الکترونی از مجموعه پایه موج تخت استفاده شد. از شبه‌پتانسیل خیلی نرم برای جایگزینی برهمکنش‌های واقعی الکترون-یون و از تقریب گرادیان شیب تعمیم یافته با استفاده از تابعی PBE برای تقریب و اعمال اثرات تبدیلی-همبستگی الکترون‌ها استفاده شد. به منظور محاسبه دقیق انرژی برای برهمکنش‌های ضعیف و اندروالسی از روش DFT-D2 با فرمول بندی گریم اعمال گردید. پس از نشان دادن گاز کربن دی اکسید در موقعیت‌های مختلف بر روی ساختار و بهینه‌سازی ساختار، مقدار انرژی جذب را می‌توان طبق معادله‌ی (۱) محاسبه نمود.

$$E_{ads} = E_{adsorbent/adsorbate} - (E_{adsorbate} + E_{adsorbent}) \quad (1)$$

جدول ۱: مقایسه‌ی بهترین انرژی جذب سه ساختار گرافداین، بوروفن BS2 و هتروبیالایر GBS2	
نام ساختار	بهترین انرژی جذب (eV)
گرافداین	-۰.۱۱۸۱۷۵۶۳۷۶
بوروفن BS2	-۰.۱۵۷۱۶۷۷۰۹۷
هتروبیالایر GBS2	-۰.۱۶۹۲۱۴۰۷۶۳

۳-نتیجه گیری

پس از انجام محاسبات بر روی ساختارهای گرافداین، بوروفن BS2 و ساختار هتروبیالایر GBS2 و محاسبه بهترین انرژی جذب برای هر یک از ساختارها؛ می‌توان نتیجه گرفت جذب بر روی ساختار هتروبیالایر شده بیشتر از دو ساختار مونولایر تشکیل دهنده آن می‌باشد و هتروبیالایر شدن این دو ساختار ویژگی جذب گاز کربن دی اکسید را بهبود بخشیده است.

۴-منابع و مراجع

- [1] Buzea, Cristina, et al. "Nanomaterials and Nanoparticles: Sources and Toxicity." *Biointerphases*, vol. 2, no. 4, 2007, pp. MR17–71.
- [2] Cao, Guozhong. *Nanostructures & Nanomaterials: Synthesis, Properties & Applications*. Imperial college press, 2004.
- [3] Jalili, Seifollah, and Atena Pakzadiyan. "Investigation of Structural, Electronic and Thermoelectric Properties of Two-Dimensional Graphdiyne/Borophene Monolayers and Hetero-Bilayers." *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 34, no. 12, 2022, p. 125501.
- [4] Oschatz, Martin, and Markus Antonietti. "A Search for Selectivity to Enable CO₂ Capture with Porous Adsorbents." *Energy & Environmental Science*, vol. 11, no. 1, 2018, pp. 57–70.
- [5] Roduner, Emil. "Size Matters: Why Nanomaterials Are Different." *Chemical Society Reviews*, vol. 35, no. 7, 2006, pp. 583–92.