

مطالعه نظریه تابعی چگالی جذب سطحی کربن دی اکسید روی زئولیت M-ABW تبادل شده با کاتیون

روح الله کریمی^۱، حسین محمدی منش^{۲*}، فاطمه پورروستائی اردکانی^۳

۱ - دانشجوی کارشناسی ارشد، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد، (ruhallahkarimi76@gmail.com)

۲ و * - نویسنده مسئول: دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد، (mohammadimanesh@yazd.ac.ir)

۳ - دانشجوی فارغ التحصیل دکتری، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد، (f.pourroustaei.a@gmail.com)

واژگان کلیدی: زئولیت Li-ABW، جذب سطحی، کربن دی اکسید، نظریه تابعی چگالی.

۱- مقدمه

زئولیت Li-ABW یک نوع ماده معدنی متخلخل با ساختار بلوری خاص است که به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد خود، به عنوان یک جاذب و کاتالیست در صنایع مختلف مورد استفاده قرار می‌گیرد. این زئولیت به طور خاص به دلیل توانایی بالای خود در تبادل یون و جذب مولکول‌های آب و دیگر ترکیبات، کاربردهای گسترده‌ای در تصفیه آب، جداسازی گازها و بهبود فرآیندهای شیمیایی دارد. مطالعه و بررسی ویژگی‌ها و کاربردهای زئولیت Li-ABW می‌تواند به توسعه فناوری‌های نوین در زمینه‌های محیط زیست و صنعت کمک شایانی نماید (فلانگن، ۱۹۹۱).

۲- روش

در این پژوهش که با استفاده از نرم افزار کوانتوم اسپرسو انجام گرفت ابتدا پارامترهای محاسباتی بهینه سازی شدند و بعد از آن ساختار زئولیت‌های Li-ABW و Na-ABW بهینه شدند. در مرحله بعد با استفاده از نظریه تابعی چگالی جذب گاز CO₂ در هر یک از زئولیت‌ها مورد بررسی قرار گرفت و خواص ساختاری و الکترونی هر یک از این دو زئولیت مورد بررسی قرار گرفت.

۳- بحث

Li-ABW نوعی زئولیت با گروه فضایی Pna2₁، گروه نقطه‌ای C₂v و فرمول تجربی [Al₄Si₄O₁₆][Li₄(H₂O)₄] است که در شبکه اورتورومبیک متبلور می‌شود. سلول واحد آن دارای ۴۰ اتم شامل اتم‌های اکسیژن، آلومینیوم، سیلیسیم، هیدروژن و لیتیم و پارامترهای شبکه آن برابر a=10.313، b=8.194 و c=4.993 آنگستروم است. با استفاده از مقاله تجربی آندرسون^۲ و سورسن^۳ شکل اولیه‌ی این زئولیت توسط برنامه وستا رسم شده و سپس با استفاده از پارامترهای بهینه شده مرحله‌ی قبل، با انجام محاسبات آرامش^۴ با کمک بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو بهینه شده‌اند (پورروستائی اردکانی، ۱۴۰۳).

¹Anderson

²Sorensen

³Relax

بعد از بهینه سازی ساختار، گاز کربن دی اکسید در حفره بزرگ کانال زئولیت جای گذاری شده است. علاوه بر این بهینه سازی با تعویض کاتیون نیز انجام شده است و کاتیون لیتیم جایگذاری و بهینه سازی شده است. در ادامه خواص ساختاری و الکترونی جذب گاز کربن دی اکسید برای هر دو زئولیت مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته شده است.
جدول ۱- مقادیر فاصله اتم های مختلف در زئولیت های Li-ABW و Na-ABW

Species	Li-ABW	Na-ABW	Li-ABW-CO ₂	Na-ABW-CO ₂
O16-O15	3.65441	3.65441	3.60372	3.60372
O24-O27	3.80830	3.65441	3.86620	3.86620
Li3-O34	-	-	2.01054	-
Na3-O34	-	-	-	2.57687

همچنین انرژی جذب برای هر دو زئولیت محاسبه شده است.

جدول ۲- انرژی الکترونی و جذب محاسبه شده زئولیت های gas-M-ABW

Species	E (Ry)	E _{ad} (Ry)	E _{ed} (kJ.mol ⁻¹)
CO ₂ -Li-ABW	-829.1633	-2.9233	-3835.3696
CO ₂ -Na-ABW	-1157.3674	-2.8633	-3756.6496

1Ry = 1312KJ.mol⁻¹

در ادامه خواص الکترونی برای هر یک از زئولیت ها محاسبه شده است.

جدول ۳- مقادیر انرژی نوار رسانش، ظرفیت و شکاف محاسبه شده زئولیت های M-ABW-CO₂

Species	E _{VBM} ¹ (eV)	E _{CBM} ² (eV)	E _g ³ (eV)
Li-ABW	1.8336	6.5636	4.7300
Na-ABW	2.1241	6.8471	4.7230
Li-ABW-CO ₂	2.3935	7.2060	4.8125
Na-ABW-CO ₂	3.0786	7.7647	4.6861

با محاسبه خواص الکترونی این نتیجه حاصل می شود که جذب گاز کربن دی اکسید در زئولیت با کاتیون لیتیم بهتر از سدیم اتفاق می افتد و علت آن هم به خاطر شاع کوچک تر لیتیم و هم چنین تجمع بار نزدیک به هسته در لیتیم، علاوه بر این مشاهده می شود انرژی شکاف در هر دو زئولیت عددی نسبتا بزرگ را نشان می دهد که می توان این نتیجه را دریافت کرد زئولیت ها تقریبا خاصیتی نیمه عایق دارند که این خاصیت باعث کارایی بالای آن ها در صنعت و تکنولوژی می شود.

۴- نتیجه گیری

این تحقیق به بررسی خواص ساختاری و الکترونی زئولیت M-ABW در حضور کاتیون های لیتیم و سدیم و گاز کربن دی اکسید می پردازد. نتایج نشان می دهد که زئولیت M-ABW دارای کانال های زیگزاگی است که گازها تمایل به قرارگیری در کانال بزرگ تر آن دارند و کاتیون های لیتیم تعامل قوی تری با CO₂ نسبت به سدیم دارند. همچنین، زئولیت ها خواص نیمه رسانایی و عایق حرارتی دارند که برای کاربردهای ویژه مفید است.

منابع و مراجع

- [1] Flanigen, E. M., Jansen, J. C., & van Bekkum, H. (Eds.). (1991). *Introduction to zeolite science and practice*. Elsevier.
- [2] Pourroustaei-Ardakani, F., Mohammadi-Manesh, H., & Hashemifar, S. J. (2024). Adsorption behavior of hydrogen sulfide in the channels of Li-ABW zeolite: A study using density functional theory. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 130, 108765.