

## عنوان مقاله:

مدل سازی فرایند جذب و واجذب هیدروژن روی ساختارهای IRMOF با استفاده از معادله حالت (PHSC)

## محل انتشار:

دومین همایش علمی مهندسی فرآیند پالایش و پتروشیمی (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

## نویسندگان:

سجاد جاویدی آل سعدی - دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی گاز دانشگاه صنعتی شیراز

فاطمه سبزی - استادیار دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز دانشگاه صنعتی شیراز

## خلاصه مقاله:

بشر امروز با دو خطر مهم زیست محیطی آلودگی هوا و گرم شدن کره زمین، که علت آن استفاده از سوخت های فسیلی می باشد مواجه شده است. هیدروژن یکی از گازهای مهمی است که به عنوان جایگزینی برای سوخت های فسیلی مطرح شده است و هیچ دی اکسید کربنی بعد از سوختن تولید نمی کند. ذخیره سازی این گاز در انواع خاصی از جاذب های نوظهور با نام IRMOF امروزه مطرح شده است. این مواد یک گروه از خانواده ساختارهای آلی-فلزی (MOF) می باشند. در این مقاله جذب و واجذب هیدروژن، بر روی چهار ساختار IRMOF شامل: IRMOF-9، IRMOF-8، IRMOF-3، و IRMOF-11 را توسط معادله حالت اختلال یافته زنجیره کره سخت (PHSC EOS) مدل سازی کرده ایم. معادله حالت اختلال یافته زنجیره کره سخت داری سه پارامتر بر مبنای واحد سازنده پلیمر است: ۲ تعداد واحدهای سازنده مولکول،  $a$  نیروهای جاذبه بین واحدهای سازنده غیر پیوندی و  $b$  معادل حجم کنار گذاشته شده وندروالسی می باشد. برای به دست آوردن این پارامترها ابتدا مولکول را به گروه های سازنده خود تفکیک کرده و با استفاده از روش هم بخشی گروهی و جمع مقادیر مربوط به هر گروه، پارامترهای موجود را به دست می آوریم سپس با استفاده از قانون تعادل فازها و برابر قرار دادن پتانسیل شیمیایی، مقادیر جذب و واجذب هیدروژن به دست آورده شد که با مقادیر تجربی مطابقت خوبی نشان می دهند.

## کلمات کلیدی:

جذب، واجذب، هیدروژن، IRMOF

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/259965>

