



شبیه‌سازی مونت کارلوی جذب آلاینده‌های خروجی از واحدهای فرآوری شیمیایی اورانیم به وسیله‌ی غشای نانولوله‌ی کربنی

علیرضا کشتکار*^۱، محمود رحمتی^۲

۱. پژوهشکده‌ی چرخه‌ی سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، صندوق پستی: ۸۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران - ایران
۲. دانشکده‌ی مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، صندوق پستی: ۴۴۱۳-۱۵۸۷۵، تهران - ایران

چکیده: غشاهای نانولوله‌ی کربنی به دلیل خواص منحصر به فرد خود می‌توانند در جذب و جداسازی ترکیب‌ها تحول‌شگرفی را ایجاد کنند. جذب آلاینده‌های حاصل از واحدهای فرآوری شیمیایی اورانیم یکی از مهم‌ترین مسایل زیست محیطی در این صنعت است. لذا به منظور بررسی کارایی غشاهای نانولوله‌ی کربنی در جذب ترکیب‌های حاصل از واحدهای فرآوری شیمیایی اورانیم، جذب دما ثابت آلاینده‌های UF_6 ، UO_2F_2 و UF_4 بر روی نانولوله‌های کربنی از طریق شبیه‌سازی مونت کارلو مورد مطالعه و بررسی قرار گرفت. در این مطالعه تأثیر فشار و اندازه‌ی قطر نانولوله‌ی کربنی بر جذب نیز مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که جذب درون نانولوله‌های کربنی به صورت $UO_2 > UF_4 > UO_2F_2 > UF_6 > F_2$ است. به عبارت دیگر، بیش‌ترین و کم‌ترین مقدار جذب درون نانولوله‌های کربنی، به ترتیب، مربوط به UO_2 و گاز F_2 است. هم‌چنین بررسی تأثیر فشار و قطر نانولوله بر میزان جذب نشان داد که با افزایش فشار و قطر نانولوله میزان جذب تمامی مواد افزایش می‌یابد و میزان تأثیر فشار به قطر نانولوله‌ی کربنی و نوع گاز بستگی دارد.

کلیدواژه‌ها: جذب، نانولوله‌ی کربنی، شبیه‌سازی مونت کارلو، آلاینده‌های فرآوری اورانیم

Monte Carlo Simulation of Adsorption of Pollutants Emitted from Uranium Chemical Processing Units Using Carbon Nanotube Membrane

A.R. Keshtkar*¹, M. Rahmati²

1. Nuclear Fuel Cycle Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 11365-8486, Tehran – Iran
2. Department of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology, P.O.Box: 15875-4413, Tehran – Iran

Abstract: The carbon nanotube membranes which have unique properties can make dramatic changes in adsorption and separation of compounds. Adsorption of pollutants from uranium chemical processing units is one of the most important environmental issues in this industry. Therefore, the adsorption isotherms of UO_2 , F_2 , UF_6 , UF_4 and UO_2F_2 into carbon nanotube were studied by using the Monte Carlo simulation in order to evaluate the performance of carbon nanotubes membranes in the uptake of compounds of uranium chemical processing units. Also in this study, the effects of pressure and diameter of the carbon nanotubes on the adsorption of compounds were investigated. The results indicate that the adsorption of compounds onto the carbon nanotubes is as follows: $UO_2 > UF_4 > UO_2F_2 > UF_6 > F_2$. In other words, the maximum and minimum adsorption onto the carbon nanotubes are related to UO_2 and F_2 , respectively. The effects of pressure and diameter of the carbon nanotubes on the adsorption of compounds show that the adsorption isotherm of all gases increases with increasing pressure and diameter of the nanotubes and the pressure influence on the adsorption of the compounds depends on the type of component and the carbon nanotubes diameter.

Keywords: Adsorption, Carbon Nanotubes, Monte Carlo Simulation, Uranium Processing Pollutants

*email: akeshkar@aeoi.org.ir



۱. مقدمه

امروزه مسأله‌ی حفاظت از محیط زیست و جلوگیری از انتشار آلاینده‌ها توسط صنایع مختلف از اصلی‌ترین مسائلی است که مهندسين با آن مواجه هستند و در این میان صنایع هسته‌ای به دلیل ماهیت آلاینده‌های آن مورد توجه خاص است. صنایع تولید سوخت هسته‌ای جای‌گاه ویژه‌ای در فن‌آوری هسته‌ای دارند و از این میان واحدهای فرآوری شیمیایی اورانیم جزء اصلی‌ترین واحدهای صنایع تولید سوخت هسته‌ای به شمار می‌روند. هم‌چنین در کلیه‌ی تأسیسات فرآوری که فرایند تولید در آن‌ها با ایجاد آلاینده‌های گازی و ذره‌ای همراه است، نصب سیستم‌های پایش و پالایش الزامی است [۱]. این یک ضرورت برای حفاظت پرسنل، مردم و محیط زیست است. در تأسیسات فرآوری اورانیم اصفهان، تصفیه‌ی آلاینده‌های گازی حاصل از واحدهای فرایندی، در واحد پایش و پالایش آلاینده‌های گازی انجام می‌شود؛ این واحد فصل مشترک کارخانه و محیط زیست، محسوب می‌شود. واحدهای پالایش و تصفیه‌ی آلاینده‌های گازی تأسیسات فرآوری شیمیایی اورانیم، برای تصفیه‌ی مواد خروجی از واحدهای تولید UF_6 ، UF_4 ، UO_2 و واحدهای تولید اورانیم فلزی طراحی شده است [۱]. ترکیب‌های ورودی واحد پایش و پالایش آلاینده‌ها حاوی UO_2 ، F_2 ، UF_6 ، UF_4 و UO_2F_2 است که باید قبل از ورود به اتمسفر تا حد استاندارد قابل رهاسازی در اتمسفر، تصفیه شود. برای جداسازی ترکیب‌های مختلف از روش‌های زیادی استفاده می‌شود که استفاده از جاذب‌های متخلخل در این زمینه کارکرد بهتری داشته‌اند [۲، ۳، ۴، ۵، ۶، ۷، ۸، ۹]. نانولوله‌های کربنی^(۱) به دلیل خواص منحصر به فرد خود، جزء یکی از بهترین کاندیداها برای جداسازی ترکیب‌های گازی به شمار می‌آیند [۱۰، ۱۱، ۱۲، ۱۳، ۱۴، ۱۵، ۱۶، ۱۷]. اگر نانولوله‌ی کربنی شامل تنها یک لوله از گرافیت باشد، نانولوله‌ی تک دیواره^(۲) (SWCNT) نامیده می‌شود. به دلیل محدودیت‌هایی که در مطالعات آزمایشگاهی وجود دارد، همواره پژوهش‌گران به دنبال روش‌های نظری جای‌گزین روش‌های عملی برای پژوهش‌های خود بوده‌اند. شبیه‌سازی مولکولی یک ابزار سودمند با قابلیت بالا است که با ظهور نانوفن‌آوری توجه بیش‌تری به آن شد. مطالعه‌ها نشان می‌دهد که در زمینه‌ی جذب و جداسازی، شبیه‌سازی مولکولی به روش مونت کارلو بسیار مرسوم است و نتایج قابل قبولی را ارائه می‌دهد [۸، ۹، ۱۰].

بنابراین هدف جذب و جداسازی آلاینده‌های حاصل از واحدهای فرآوری شیمیایی اورانیم به وسیله‌ی نانولوله‌های کربنی تک دیواره بررسی بیش‌تر امکان کاربرد نانولوله‌ها در این زمینه است. در این مطالعه، امکان کاربرد نانولوله‌های کربنی به عنوان جاذب برای جذب آلاینده‌های خروجی از واحد فرآوری شیمیایی اورانیم شامل UO_2 ، F_2 ، UF_6 ، UF_4 و UO_2F_2 به صورت خالص در دمای ۲۹۸ K و در دو بازه‌ی فشاری ۰ تا ۱۰۰ و ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ kpa مورد بررسی قرار گرفت. هم‌چنین اثر قطر نانولوله نیز بررسی شد.

۲. روش کار

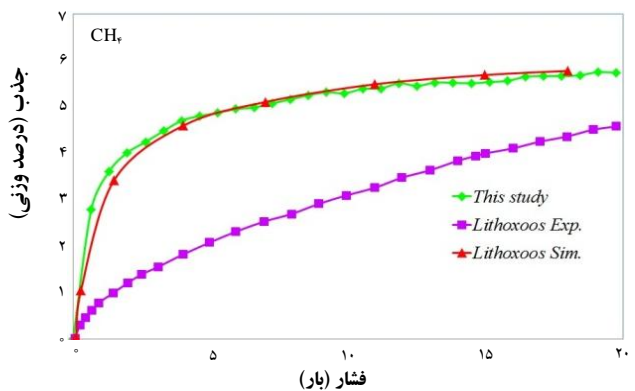
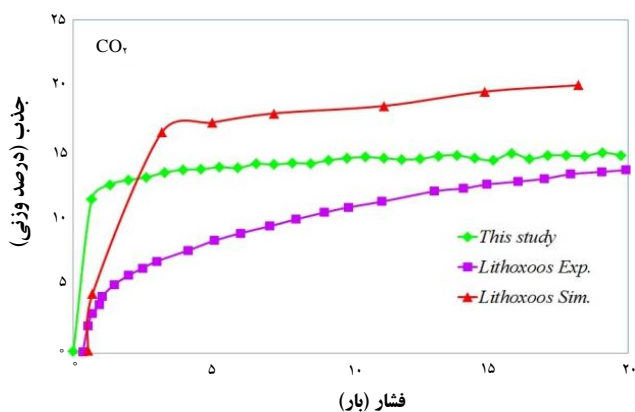
در شبیه‌سازی مولکولی جذب سطحی مولکول‌های جذب شونده در درون نانولوله‌های کربنی، دو نوع برهم‌کنش جذب شونده-جذب شونده و برهم‌کنش جذب شونده-نانولوله وجود دارد. در این مطالعه از میدان نیرو^(۳) برای مدل‌سازی برهم‌کنش‌های بین مولکولی استفاده شد. بعد از انتخاب مدل انرژی، انتخاب مدل مناسب برای ساختار نانولوله‌ی کربنی و تشکیل جعبه‌ی شبیه‌سازی یکی از مهم‌ترین مراحل شبیه‌سازی مولکولی به حساب می‌آید. معمولاً نانولوله‌ی کربنی به صورت ساختاری صلب و بدون انعطاف در نظر گرفته می‌شود. جعبه‌ی شبیه‌سازی متشکل از ۱ ساختار نانولوله‌ی کربنی به طول ۱۲ نانومتر بود. از شرایط مرزی متناوب^(۴) برای ایجاد یک سیستم بی‌انتهای استفاده شد. برای کاهش زمان و حجم محاسبات از شعاع قطع^(۵) ۱۰ nm برای شعاع مجاز برهم‌کنش استفاده شد [۹، ۱۰].

پس از مشخص شدن مدل برهم‌کنش و ساختار سیستم می‌باید از الگوریتم مناسب استفاده می‌شود. در شبیه‌سازی مولکولی به روش مونت کارلو از الگوریتم متروپولیس^(۶) برای ایجاد موقعیت‌های جدید استفاده می‌شود. در شبیه‌سازی مونت کارلو به روش مجموعه‌بندادی بزرگ^(۷) (GCMC)، حجم، دما و پتانسیل شیمیایی ثابت است، در حالی که تعداد مولکول‌ها یا اتم‌ها تغییر می‌کند [۱۷، ۱۸]. مطالعه‌های انجام شده در زمینه‌ی جذب و جداسازی ترکیب‌های مختلف توسط غشای غیرآلی نشان می‌دهد که روش مونت کارلو یک روش کارآمد و مناسب در این زمینه است و داده‌های حاصل از آن با داده‌های آزمایشگاهی هم‌خوانی مناسب و خوبی دارد [۱۹، ۲۰، ۲۱].

تعداد مراحل شبیه‌سازی یک میلیون بود که ۵۰ درصد آن برای رسیدن سیستم به تعادل در نظر گرفته شد. با هر بار تکرار، به

جذب دما ثابت کربن دی اکسید و متان درون نانولوله‌ی کربنی تک دیواره‌ای (۹، ۹) در دمای ۲۹۸ K و فشار ۰ تا ۲۰ بار از طریق شبیه‌سازی مولکولی به روش مونت کارلو بررسی و نتایج آن با داده‌های ارایه شده توسط لیتوکسوس و همکاران [۱۴] در شرایط یکسان مقایسه شد. شکل ۱ نتایج شبیه‌سازی جذب دما- ثابت گاز کربن دی اکسید در درون نانولوله‌ی کربنی تک دیواره‌ای (۹، ۹) در دمای ۲۹۸ K و داده‌های آزمایشگاهی موجود را نشان می‌دهد.

تنها تفاوت این شبیه‌سازی با شبیه‌سازی که توسط لیتوکسوس انجام شد در استفاده از میدان نیروهای متفاوت است. شکل ۱ نشان می‌دهد که نتایج حاصل از شبیه‌سازی انجام شده در این مطالعه، نسبت به نتایج شبیه‌سازی لیتوکسوس و همکاران مطابقت خیلی بهتری با داده‌های آزمایشگاهی دارد. اختلاف بین نتایج شبیه‌سازی و داده‌های آزمایشگاهی مربوط به تفاوت بین ساختار نانولوله‌ی در نظر گرفته شده برای شبیه‌سازی با نانولوله‌های مورد استفاده در آزمایشگاه است چرا که نمی‌توان نانولوله‌ای تهیه کرد که صد در صد خالص و یکنواخت باشد.



شکل ۱. جذب دما- ثابت گاز کربن دی اکسید و متان در درون نانولوله‌ی کربنی تک دیواره‌ای (۹، ۹).

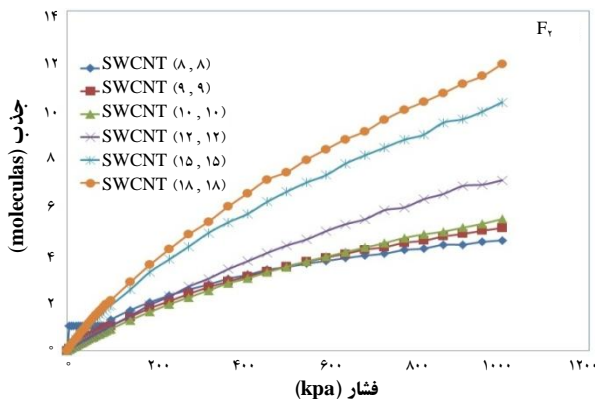
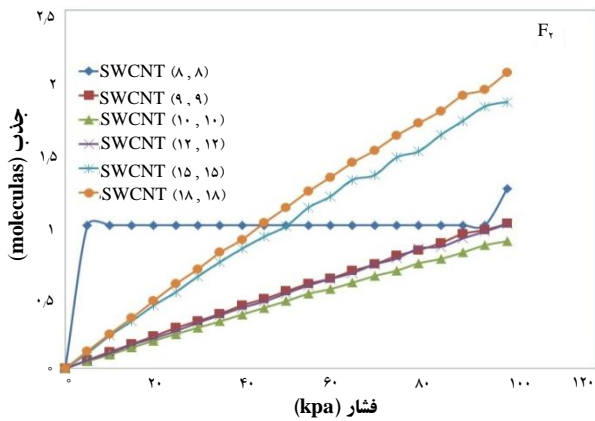
طور تصادفی یکی از مولکول‌های جذب شونده‌ی موجود در نانولوله‌ی کربنی توسط یک عدد تصادفی انتخاب می‌شود. پس از انتخاب مولکول مورد نظر، توسط عدد تصادفی دیگری یک حرکت به این مولکول نسبت داده می‌شود. با توجه به ساختار مواد مورد بررسی حرکات ایجاد، حذف، جابه‌جایی، چرخش و خمش زاویه‌ای در نظر گرفته شد. با توجه به نوع حرکت، تغییرات در سیستم ایجاد می‌شود و سپس به وسیله‌ی رابطه‌های پذیرش مربوط به همان حرکت، حرکت پذیرفته و یا رد می‌شود. جزییات مربوط به رابطه‌های پذیرش و عدم پذیرش حرکات تصادفی در مطالعات قبلی نیز موجود است [۸]. برای استفاده‌ی هر مولکول در شبیه‌سازی لازم است ساختار فضایی آن کاملاً مشخص شود. بنابراین در ابتدا ساختار اولیه ایجاد و سپس توسط روش کمینه‌سازی انرژی^(۸) بهینه می‌شود. نتایج حاصل از بهینه‌سازی ساختار مولکول‌های آلاینده‌ها در جدول ۱ خلاصه شده است.

۳. نتایج و بحث

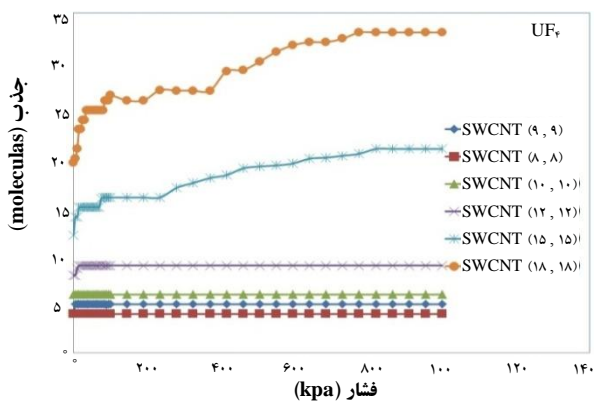
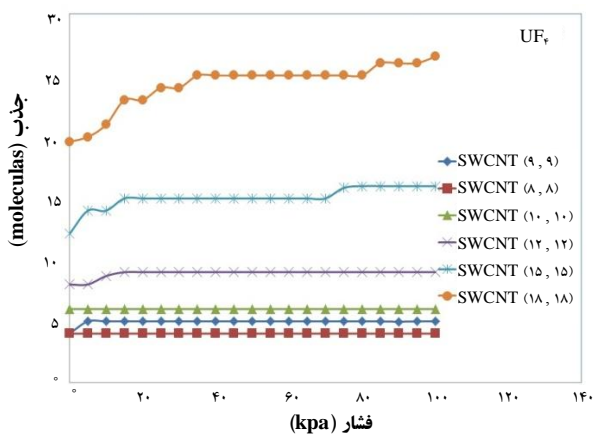
نظر به این که مطالعه‌های انجام شده در زمینه‌ی شبیه‌سازی مولکولی فرایند جذب و جداسازی به وسیله‌ی نانولوله‌های کربنی بحثی جدید و نو است داده‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی در این زمینه وسعت چندانی ندارد به خصوص در زمینه‌ی جذب ترکیب‌های اورانیم گازی بر روی نانولوله‌ها مطالعه‌های آزمایشگاهی و یا شبیه‌سازی موجود نیست. بنابراین به منظور بررسی صحت نتایج شبیه‌سازی در ابتدا با توجه به داده‌های آزمایشگاهی قابل دسترس برای گازهای کربن دی اکسید و متان شبیه‌سازی جذب بر روی نانولوله‌های کربنی انجام و سپس نتایج حاصله با داده‌های موجود مقایسه شد. پس از اطمینان از صحت نتایج به بررسی جذب ترکیب‌های گازی اورانیم بر روی نانولوله‌های کربنی پرداخته شد.

جدول ۱. اطلاعات ساختاری مولکول‌های آلاینده‌ها

مولکول آلاینده	طول پیوند (Å)	زاویه‌ی پیوند
CO ₂	۱,۱۶۰	۱۸۰
UF ₂	۱,۹۸۲	۱۸۰
UF ₄	۲,۳۳۰	۱۰۹,۴۷۱
UF ₆	۲,۱۶۳	۹۰
UO ₂ F ₂	U=O=۲,۳۵۰ U-F=۲,۳۳۰	۱۰۹,۴۷۱
F ₂	۱,۴۲	۱۸۰
CH ₄	۱,۱۰۹	۱۰۹,۴۷۱



شکل ۲. جذب دما- ثابت گاز F_2 در درون نانولوله‌های کربنی.



شکل ۳. جذب دما- ثابت UF_6 در درون نانولوله‌های کربنی.

شکل ۱ هم‌چنین نتایج شبه‌سازی جذب دما- ثابت گاز متان در درون نانولوله‌ی کربنی تک دیواره‌ای (۹،۹) در دمای ۲۹۸ K و داده‌های آزمایشگاهی موجود را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از شبه‌سازی ما کاملاً بر نتایج شبه‌سازی لیتوکسوس منطبق است. مقداری اختلاف بین نتایج حاصل از شبه‌سازی و داده‌های آزمایشگاهی در این‌جا نیز مشاهده می‌شود. بنابراین به استناد این نتایج می‌توان گفت که فرایند شبه‌سازی مولکولی در درون نانولوله‌های کربنی به خوبی انجام شده است و مقایسه‌ی نتایج حاصل از شبه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی موجود این موضوع را نیز تأیید می‌کند. بنابراین در ادامه به بررسی جذب دما ثابت آلاینده‌های UF_6 ، UF_4 ، F_2 ، UO_2 در درون نانولوله‌های کربنی با اندازه‌ی قطر مختلف در فشارهای کم و متوسط پرداخته شد تا تأثیر فشار و اندازه‌ی قطر نانولوله مورد مطالعه قرار گیرد.

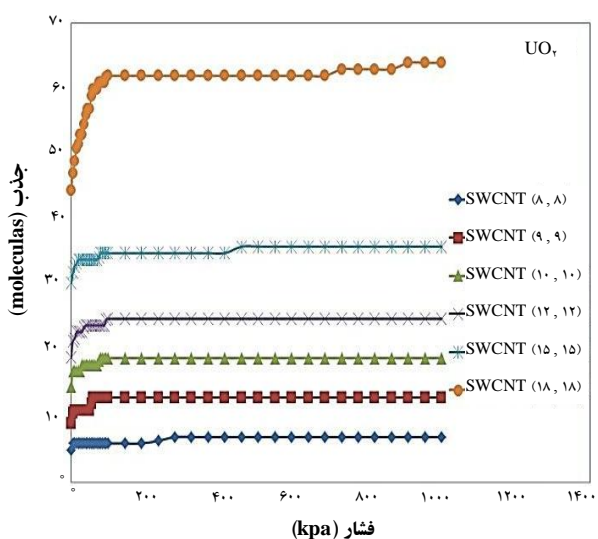
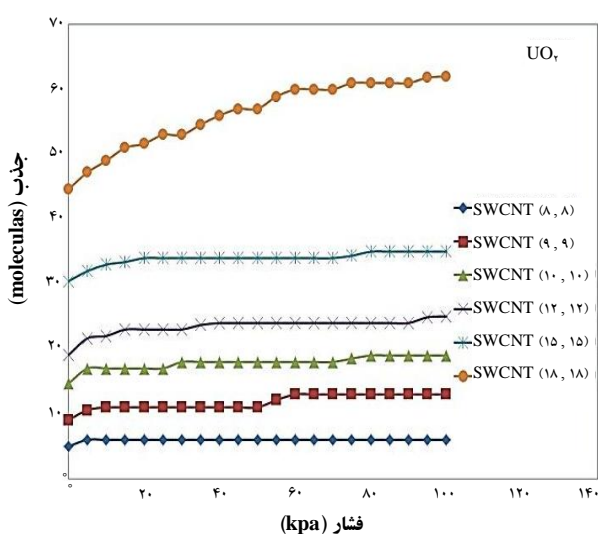
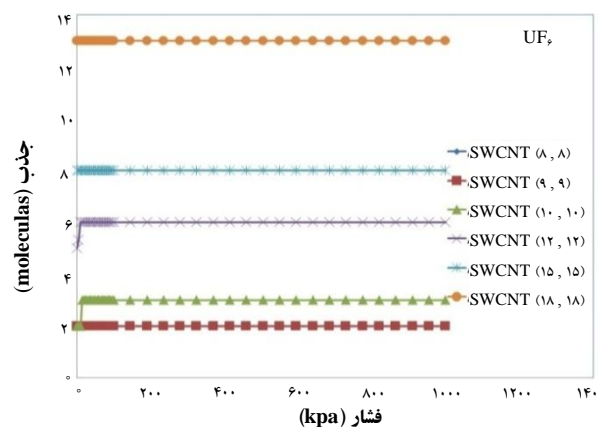
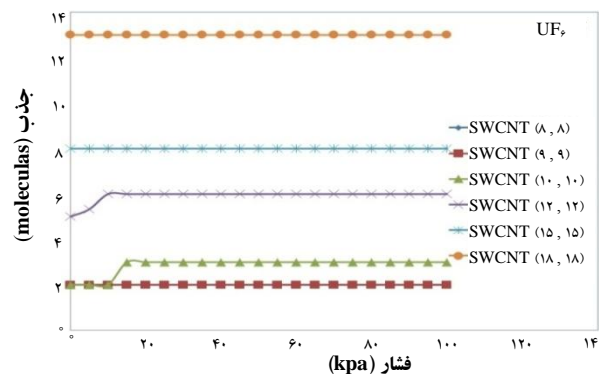
شکل ۲ جذب دما ثابت گاز F_2 در درون نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که میزان جذب این گاز در درون نانولوله بسیار ناچیز است و با افزایش قطر نانولوله و فشار مقدار آن افزایش می‌یابد. هم‌چنین مشاهده می‌شود که تأثیر افزایش فشار بر افزایش جذب به قطر نانولوله بستگی دارد و برای نانولوله‌ی تک دیواره‌ای (۸، ۸) این اثر ناچیز است.

شکل ۳ جذب دما- ثابت UF_6 در درون نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد که تأثیر افزایش فشار بر میزان جذب این ماده در درون نانولوله بسیار ناچیز است و با افزایش قطر نانولوله این اثر افزایش می‌یابد، به طوری که می‌توان گفت تنها در نانولوله‌ی تک دیواره‌ای (۱۸، ۱۸) و (۱۵، ۱۵) با افزایش فشار، مقدار جذب افزایش می‌یابد. تأثیر افزایش فشار بر مقدار جذب UF_6 تنها در نانولوله‌های کربنی تک لایه‌ای (۱۸، ۱۸) و (۱۵، ۱۵) در فشارهای بالا مشاهده می‌شود و برای سایر نانولوله‌ها هیچ تأثیری ندارد.

شکل ۴ جذب دما- ثابت UF_6 در درون نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که افزایش فشار بر میزان جذب این ماده هیچ تأثیری ندارد. این مهم به دلیل ساختار فضایی UF_6 است و افزایش فشار نمی‌تواند بر ممانعت فضایی بین مولکول‌های UF_6 و هم‌چنین با بدنه‌ی نانولوله غلبه کند. هم‌چنین نتایج نشان می‌دهند که میزان جذب در نانولوله‌های کربنی تک دیواره‌ای (۸، ۸) و (۹، ۹) برابر است. چون در صنعت بیش‌تر از بسترهای کربن فعال برای جذب UF_6 استفاده می‌شود، نتایج شکل ۴ با داده‌های آزمایشگاهی جذب UF_6 بر روی کربن فعال که توسط افشاری و همکاران [۲۲] ارائه شده است، مقایسه شد.

جدول ۲. میزان جذب UF_6 به وسیله‌ی نانولوله‌های کربنی مختلف

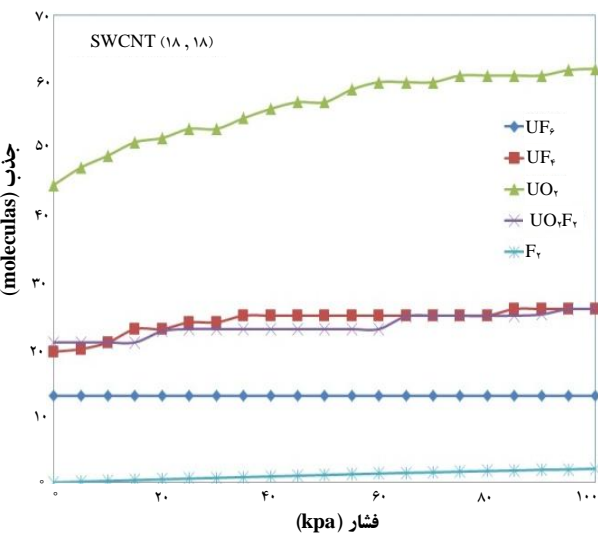
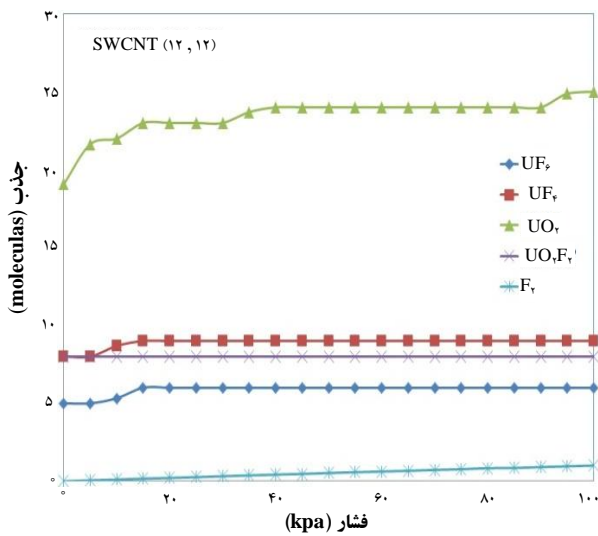
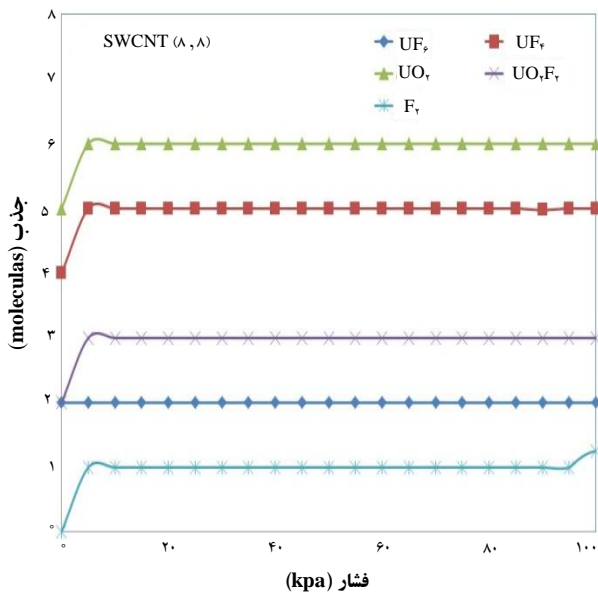
میزان جذب UF_6		ساختار نانولوله
gr/gr	مولکول	
۰,۸۸۲	۱۳	SWNT ۱۸, ۱۸
۰,۶۵۱	۸	SWNT ۱۵, ۱۵
۰,۶۱۰	۶	SWNT ۱۲, ۱۲
۰,۳۶۷	۳	SWNT ۱۰, ۱۰
۰,۲۷۱	۲	SWNT ۹, ۹
۰	۰	SWNT ۸, ۸


شکل ۵. جذب دما- ثابت UF_6 در درون نانولوله‌های کربنی.

شکل ۴. جذب دما- ثابت UF_6 در درون نانولوله‌های کربنی.

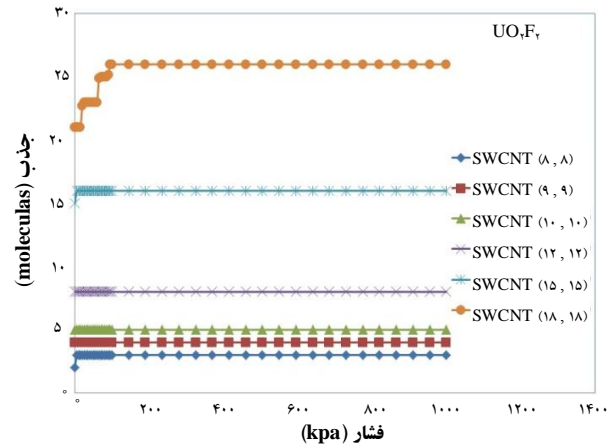
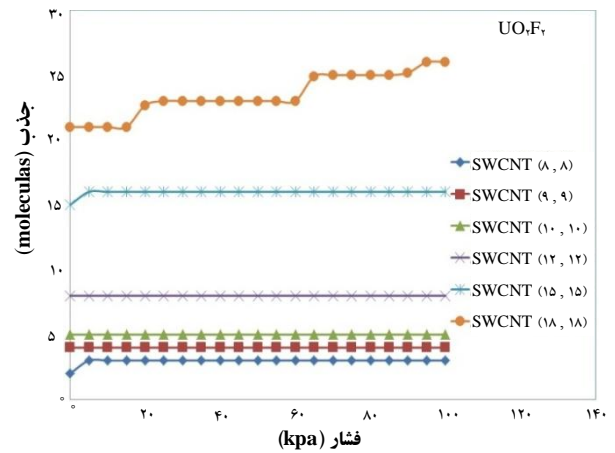
افشاری و همکاران [۲۲] حداکثر میزان جذب UF_6 به وسیله‌ی کربن فعال در دمای $293K$ و فشار بسیار کم را $1/1$ گرم UF_6 به ازای یک گرم کربن فعال گزارش کردند. جدول ۲، نتایج شبیه‌سازی جذب UF_6 به وسیله‌ی نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد. بیش‌ترین مقدار جذب UF_6 به وسیله‌ی نانولوله‌ی کربنی $0,882$ gr/gr محاسبه شده است که در مقایسه با کربن فعال کم‌تر است.

شکل ۵ جذب دما ثابت UF_6 در درون نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که افزایش فشار بر میزان جذب این ماده در درون نانولوله در فشارهای پایین بیش‌تر است و با افزایش قطر نانولوله، این اثر بیش‌تر می‌شود. می‌توان گفت که در فشارهای بیش‌تر از 100 kpa افزایش فشار دیگر تقریباً اثری بر جذب ندارد.

شکل ۶ جذب دما- ثابت UF_6 در درون نانولوله‌ی کربنی را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که اثر افزایش فشار بر میزان جذب این ماده در درون نانولوله‌ی کربنی در فشارهای پایین بسیار ناچیز است و بیش‌ترین اثر مربوط به نانولوله‌ی کربنی تک دیواره‌ای $(18, 18)$ است و در فشارهای بالا افزایش فشار هیچ تأثیری بر میزان جذب آن ندارد.



شکل ۷. جذب دما- ثابت UF_6 , UF_4 , UO_2 , F_2 , UO_2F_2 در درون نانولوله‌های تک دیواره‌ای (۸, ۸) و (۱۲, ۱۲) و (۱۸, ۱۸).



شکل ۶. جذب دما- ثابت UO_2F_2 در درون نانولوله‌های کربنی.

میزان جذب دما- ثابت آلاینده‌های UF_6 , UF_4 , F_2 , UO_2 در درون نانولوله‌های تک دیواره‌ای (۸, ۸)، UO_2F_2 در درون نانولوله‌های کربن تا فشار ۱۰۰ kpa در شکل ۷ نشان داده شده است. از شکل ۷ مشاهده می‌شود که ترتیب جذب در درون نانولوله‌ی تک پایه‌ای (۸, ۸) $UO_2 > UF_4 > UO_2F_2 > UF_6 > F_2$ است. بیش‌ترین میزان جذب گاز F_2 و UO_2 به وسیله‌ی نانولوله کربنی تک پایه‌ای (۱۸, ۱۸) به ترتیب، ۰/۸۸ و $3/330 \text{ gr/gr}$ است.

روند مشابهی نیز برای جذب در درون لوله‌های نانو کربنی تک دیواره‌ای (۱۲, ۱۲) و (۱۸, ۱۸) مشاهده می‌شود با این تفاوت که میزان جذب UF_6 و UO_2F_2 با افزایش قطر نانولوله‌ی کربنی به هم نزدیک می‌شود به طوری که در نانولوله‌ی کربنی تک دیواره‌ای (۱۸, ۱۸) میزان جذب کاملاً برابر است. هم‌چنین شکل ۷ نشان می‌دهد که با افزایش قطر نانولوله میزان جذب تمامی مواد مورد مطالعه‌ی این پژوهش افزایش می‌یابد. روند جذب این مواد در درون نانولوله‌های کربنی کاملاً به ساختار فضایی آن‌ها بستگی دارد و تأثیر آشکار ساختار بر روی نتایج مشخص است.



۳/۳۳۰ gr/gr است. بیش‌ترین میزان جذب UF_6 به وسیله‌ی نانولوله‌ی کربنی تک دیواره‌ای (۱۸، ۱۸)، ۰/۸۸۲ gr/gr است. هم‌چنین مشاهده شد که با افزایش قطر نانولوله‌های کربنی علاوه بر این که میزان جذب تمامی آلاینده‌ها افزایش می‌یابد، میزان جذب UF_6 و UO_2F_2 نیز به هم نزدیک می‌شوند اما مقدار جذب UO_2F_2 هم‌چنان بیش‌تر است. به طور کلی می‌توان گفت که قطر نانولوله‌ی کربنی، شکل فضایی آلاینده‌ها و اتم‌های تشکیل‌دهنده‌ی ساختار مولکولی نقش بسیار مهمی در مقدار جذب آن‌ها دارد.

پی‌نوشت‌ها

1. Carbon Nanotubes
2. Single Walled Carbon Nanotubes
3. Universal Force Field
4. Periodic Boundary Condition
5. Cut-Off
6. Metropolis
7. Grand Canonical Monte Carlo
8. Minimization Energy

ساختار فضایی خطی UO_2 سبب کاهش ممانعت فضایی ناشی از برهم‌کنش آن‌ها با یک‌دیگر و هم‌چنین با جداره‌ی نانولوله‌ی کربنی می‌شود؛ بنابراین جذب بیش‌تری در درون فضای خالی نانولوله‌ی کربنی خواهد داشت. اتم اکسیژن، به دلیل ۲ الکترون جفت نشده‌اش، تمایل به جذب الکترون زیادی دارد و خاصیت پارامغناطیسی از خود نشان می‌دهد. مولکول UO_2 به دلیل دارا بودن الکترون جفت نشده، تمایل زیادی دارد که الکترون‌های خود را با الکترون آزاد موجود در حلقه‌های کربنی نانولوله جفت کند. اما مولکول F_2 به دلیل این که الکترون آزادی در ساختار خود ندارد خاصیت دیامغناطیسی از خود نشان می‌دهد به همین دلیل تمایلی برای جذب در درون ساختار نانولوله‌ی کربنی ندارد. بنابراین با توجه به دلایل ارایه شده، انتظار می‌رود UF_6 مقدار جذب کم‌تری نسبت به UO_2F_2 داشته باشد. بررسی نتایج حاصل از رفتار جذبی آن‌ها در شکل‌های ۳ و ۶ نیز این را تأیید می‌کند که UF_6 به دلیل اثر حضور اتم‌های F در ساختار مولکولی خود تمایل کم‌تری برای حضور در نانولوله‌ی کربنی دارد.

هم‌چنین نتایج جذب دما- ثابت آلاینده‌ها در درون نانولوله‌های کربنی تک دیواره‌ای (۸، ۸) و (۱۸، ۱۸) نشان می‌دهد که افزایش فشار تأثیری بر میزان جذب UF_6 ندارد اما برای سایر آلاینده‌ها اثرگذار است به طوری که بیش‌ترین مقدار جذب در شرایط کاملاً یکسان متعلق به UO_2 و کم‌ترین جذب متعلق به گاز F_2 است. این در حالی است که جذب دما- ثابت آلاینده‌ها در درون نانولوله کربنی تک دیواره‌ای (۱۲، ۱۲) نشان می‌دهد که افزایش فشار به غیر از UO_2F_2 بر میزان جذب سایر آلاینده‌ها نیز تأثیر دارد. بنابراین به طور کلی می‌توان گفت که متناسب با این که هدف جداسازی چه آلاینده‌ها از خوراک ورودی است باید نانولوله مناسب را انتخاب نمود.

۴. نتیجه‌گیری

جذب دما ثابت آلاینده‌های خروجی واحدهای فرآوری شیمیایی اورانیم UO_2 ، F_2 ، UF_6 ، UF_4 و UO_2F_2 به وسیله‌ی نانولوله‌های کربنی با اندازه‌ی قطر مختلف، از راه شبیه‌سازی مونت کارلو مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که بیش‌ترین و کم‌ترین میزان جذب در درون نانولوله‌های کربنی، به ترتیب، مربوط به UO_2 و گاز F_2 است. بیش‌ترین و کم‌ترین میزان جذب در درون نانولوله‌ی کربنی تک دیواره‌ای (۱۸، ۱۸)، به ترتیب، ۰/۸۸ و



1. A. Sadighzadeh, M. Rostami, S. Sana, Study of Gaseous Pollutants Purification and Filtration System of Uranium Conversion Facility (UCF), *J. Nuclear Sci. Tech.* 51 (2010) 63-69.
2. M.G. Ahunbay, O. Karvan, A. Erdem-Senatalar, MTBE Adsorption and Diffusion in Silicalite-1, *Micropor. Mesopor. Mat.* 115 (2008) 93-97.
3. Cruz FJAL, Esteves IAAC, Agnihotri S, J.P.B. Mota, Adsorption Equilibria of Light Organics on Single-Walled Carbon Nanotube Heterogeneous Bundles: Thermodynamical Aspects, *J. Phys. Chem. C* 115 (2011) 2622-2629.
4. L.J. Dunne, A. Furgani, S. Jalili, G. Manos, Monte-Carlo Simulations of Methane/Carbon Dioxide and Ethane/Carbon Dioxide Mixture Adsorption in Zeolites and Comparison with Matrix Treatment of Statistical Mechanical Lattice Model, *Chem. Phys.* 359 (2009) 27-30.
5. M. Foroutan, A.T. Nasrabadi, Adsorption Behavior of Ternary Mixtures of Noble Gases Inside Single-Walled Carbon Nanotube Bundles, *Chem. Phys. Lett.* 497 (2010) 213-217.
6. L. Huang, L. Zhang, Q. Shao, L. Lu, X. Lu, S. Jiang, W. Shen, Simulations of Binary Mixture Adsorption of Carbon Dioxide and Methane in Carbon Nanotubes: Temperature, Pressure, and Pore Size Effects, *J. Phys. Chem. C*, 111 (2007) 11912-11920.
7. A.V.A. Kumar, H. Jobic, S.K. Bhatia, Quantum Effects on Adsorption and Diffusion of Hydrogen and Deuterium in Microporous Materials, *J. Phys. Chem. B*, 110 (2006) 16666-16671.
8. M. Rahmati, H. Modarress, Nitrogen Adsorption on Nanoporous Zeolites Studied by Grand Canonical Monte Carlo Simulation, *J. Mol. Struct. (Theochem)* 901 (2009) 110-116.
9. M. Rahmati, H. Modarress, Grand Canonical Monte Carlo Simulation of Isotherm for Hydrogen Adsorption on Nanoporous Siliceous Zeolites at Room Temperature, *Applied Surface Science*, 255 (2009) 4773-4778.
10. D. Cao, W. Wang, Storage of Hydrogen in Single-Walled Carbon Nanotube Bundles with Optimized Parameters: Effect of External Surfaces, *Int. J. Hydrogen Energy*, 32 (2007) 1939-1942.
11. H. Chen, D.S. Sholl, Predictions of Selectivity and Flux for CH₄/H₂ Separations Using Single Walled Carbon Nanotubes as Membranes, *J. Membrane Sci.* 269 (2006) 152-160.
12. Y.L. Chen, B. Liu, J. Wu, Y. Huang, H. Jiang, K.C. Hwang, Mechanics of Hydrogen Storage in Carbon Nanotubes, *J. Mech. Phys. Solids*, 56 (2008) 3224-3241.
13. C. Gu, G.H. Gao, Y.X. Yu, T. Nitt, Simulation for Separation of Hydrogen and Carbon Monoxide by Adsorption on Single-Walled Carbon Nanotubes, *Fluid Phase Equilibr.* 194-197 (2002) 297-307.
14. G.P. Lithoxoos, A. Labropoulos, L.D. Peristeras, N. Kanellopoulos, J. Samios, I.G. Economou, Adsorption of N₂, CH₄, CO and CO₂ Gases in Single Walled Carbon Nanotubes: A Combined Experimental and Monte Carlo Molecular Simulation Study, *J. Supercrit. Fluids* 55 (2010) 510-523.
15. M. Rzepka, P. Lamp, M.A. delaCasa-Lillo, Physisorption of Hydrogen on Microporous Carbon and Carbon Nanotubes, *J. Phys. Chem. B* 102 (1998) 10894-10898.
16. X. Zhang, D. Cao, J. Chen, Hydrogen Adsorption Storage on Single-Walled Carbon Nanotube Arrays by a Combination of Classical Potential and Density Functional Theory, *J. Phys. Chem. B*, 107 (2003) 4942-4950.
17. X. Zhang, X. Shao, W. Wang, D. Cao, Molecular Modeling of Selectivity of Single-Walled Carbon Nanotube and MCM-41 for Separation of Methane and Carbon Dioxide, *Sep. Purif. Technol.* 74 (2010) 280-287.
18. L. Lu, Q. Shao, L. Huang, X. Lu, Simulation of Adsorption and Separation of Ethanol-Water Mixture with Zeolite and Carbon Nanotube, *Fluid Phase Equilibr.* 261 (2007) 191-198.



19. Y. Zeng, X. Zhu, Y. Yuan, X. Zhang, S. Ju, Molecular Simulations for Adsorption and Separation of Thiophene and Benzene in Cu-BTC and IRMOF-1 Metal-Organic Frameworks, *Sep. Purif. Technol.* 95 (2012) 149-156.
20. M.K. Song, K.T. No, Molecular Simulation of Hydrogen Adsorption in Organic Zeolite, *Catal. Today*, 120 (2007) 374-382.
21. D.H. Jung, D. Kim, T.B. Lee, S.B. Choi, J.H. Yoon, J. Kim, K. Choi, S.H. Choi, Grand Canonical Monte Carlo Simulation Study on the Catenation Effect on Hydrogen Adsorption Onto the Interpenetrating Metal-Organic Frameworks, *J. Phys. Chem. B*, 110 (2006) 22987-22990.
22. M. Afsari, J. Safdari, J. Towfighi, M.H. Mallah, The Adsorption Characteristics of Uranium Hexafluoride Onto Activated Carbon in Vacuum Conditions, *Annals of Nuclear Energy*, 46 (2012) 144-151.