

## عنوان مقاله:

شبیه سازی مولکولی جذب سطحی متان، اتان، پروپان و بوتان در نانو زئولیت FAU

## محل انتشار:

دومین همایش ملی تبدیل گاز طبیعی (سال: 1387)

تعداد صفحات اصل مقاله: 2

## نویسندگان:

محمود رحمتی - دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی شیمی

حمید مدرس - دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی شیمی

## خلاصه مقاله:

شبیه سازی مقدار جذب دما ثابت متان، اتان، پروپان و بوتان در نانو زئولیت با ساختار FAU در دمای 300 درجه کلون و فشارهای متفاوت توسط روش مونت کارلو (Grand Canonical Monte Carlo Simulations) به همراه روش وضعیت جهت دار مونت کارلو (The Configurational Bias Monte Carlo) مورد محاسبه قرار گرفته است. نتایج حاصل از شبیه سازی با نتایج آزمایشگاهی موجود مقایسه و ارائه شده است. نتایج نشان میدهد که در فشار های پایین، آلکان های بلند مقدار جذب سطحی بیشتری نسبت به آلکان های کوتاه دارند و در فشار بالا آلکان های کوتاه بیشترین مقدار جذب را خواهند داشت.

## کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/43072>

