شبیه‌سازی اتمی نمک‌زدایی آب با استفاده از غشای گرافاین

عادل نعمتی‌پور1، احسان هوشفر2، میرمسعود سیدفخرآبادی3\*

1- کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران

2- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران

3- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران

\*تهران، صندوق پستی 11155-4563، mfakhrabadi@ut.ac.ir

چکیده

در این پژوهش با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی امکان به‌کارگیری غشاهای گرافاین در سیستم نمک‌زدایی آب بررسی شده است. برای این منظور، از غشاهای گرافاین-۲، گرافاین-۳ و گرافاین-۴ در فشارهای 10، 50 و MPa 100 جهت بررسی اثر فشار و همچنین اندازه قطر سوراخ غشا بر عملکرد نانو سیستم نمک‌زدایی استفاده شده است. در ضمن برای درک بهتر مکانیزم دفع یون، ساختار پوسته هیدراسیون یون‌ها نیز مورد تحلیل قرار گرفته است، زیرا این ساختار نقش کلیدی را در عملکرد نمک‌زدایی سیستم ایفا می‌کند. نتایج شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهند که غشای گرافاین-۲ در تمامی فشارها غیر قابل نفوذ و غشاهای گرافاین-۳ و گرافاین-۴ به ترتیب دارای نفوذپذیری 92/49 و L/cm2/day/MPa 95/50 هستند. همچنین دفع یون برای غشاهای گرافاین-۲ و گرافاین-۳ در تمامی فشارها 100 درصد بوده و برای غشای گرافاین-۴ دفع یون در فشارهای 10 و MPa 50 به میزان 55/95 درصد و در فشار MPa 100، برابر با 33/93 درصد می‌باشد. در نتیجه می‌توان گفت که با افزایش فشار و قطر سوراخ‌های غشا، درصد دفع یون کاهش می‌یابد ولی از طرفی نرخ جریان آب عبوری از غشا افزایش پیدا می‌کند. در پایان پژوهش نیز غشای گرافاین-۳ به خاطر دفع یون 100 درصدی و نرخ مناسب جریان آب در آن به عنوان یک غشای ایده‌آل برای نمک‌زدایی معرفی شده است.

**کلی**د‌واژگ**ان**

گرافاین، نمک‌زدایی، غشا، دینامیک مولکولی، آب

Atomistic simulation of water desalination using graphyne membrane

Adel Nematipour, Ehsan Houshfar, Mir Masoud Seyyed Fakhrabadi\*

School of Mechanical Engineering, College of Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran.

\* P.O.B. 11155-4563 Tehran, Iran, mfakhrabadi@ut.ac.ir

Abstract

In this paper, molecular dynamics simulation method was used to investigate the possibility of using graphyne membranes in water desalination systems. In the simulation, graphyne-2, graphyne-3, and graphyne-4 membranes at pressure levels of 10, 50, and 100 MPa were utilized to study the effects of pressure and the size of membrane pore diameters on the performance of the nanosystem. Furthermore, to better understand the mechanism of ion rejection, the hydration shell structure of ions is analyzed since this structure plays a pivotal role in the performance of the system. The results show that graphyne-2 membrane is impermeable at all the mentioned pressure values, while the permeability of graphyne-3 and graphyne-4 membranes are 49.92 and 50.95 L/cm2/day/MPa, respectively. Besides, the ion rejection for graphyne-2 and graphyne-3 membranes is 100% at all pressure values, while for graphyne-4 membrane the ion rejection at 10 and 50 MPa is 95.55%, and at pressure of 100 MPa is 93.33%. The results further indicated that the rate of ion rejection decreases with membrane pressure and its pore diameter, whereas the rate of water flow through the membrane enhances with membrane pressure and pore diameter. Moreover, the results demonstrated that the graphyne-3 membrane the ideal alternative for the desalination process thanks to its permeability and great ability in ion rejection.

Keywords

Graphyne, Desalination, Membrane, Molecular dynamic, Water