

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جذب مخلوط اکسیژن و نیتروژن روی نانومخروط و نانولوله کربنی

رویا مجیدی*⁺، خدیجه منصوری

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران، ایران

چکیده: جذب و جداسازی اکسیژن و نیتروژن توسط نانومخروط کربنی 240° بررسی شده و نتیجه‌ها با نانولوله کربنی تک دیواره (10 و 10) مقایسه شد. مقدار جذب گازها در دما و فشارهای گوناگون با استفاده از روش دینامیک مولکولی محاسبه شد. نتیجه‌های شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهند که گازها در سطح خارجی و فضای خالی درونی نانومخلوط و نانولوله کربنی جذب شده‌اند. مقدار گاز جذب شده، با افزایش فشار افزایش یافته و سرانجام به شرایط اشباع رسیده است. در هر دو ساختار، گاز اکسیژن بیش از گاز نیتروژن جذب شده است. با کاهش دما مقدار گاز جذب شده در شرایط اشباع و ظرفیت ذخیره سازی وزنی کاهش یافته است. همچنین نتیجه‌ها بیانگر است که ظرفیت جذب و توان جداسازی نانومخروط کربنی نسبت به نانولوله کربنی بالاتر است. بنابراین نانومخلوط‌های کربنی کاندیدای مناسبی برای ذخیره و جداسازی اکسیژن موجود در هوا هستند.

واژه‌های کلیدی: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی؛ نانومخروط کربنی؛ نانولوله کربنی؛ هنگرد NVT؛ تفکیک گاز.

KEYWORDS: Molecular dynamics simulation; Carbon nanocone; Carbon nanotube; NVT ensemble; Gas separation.

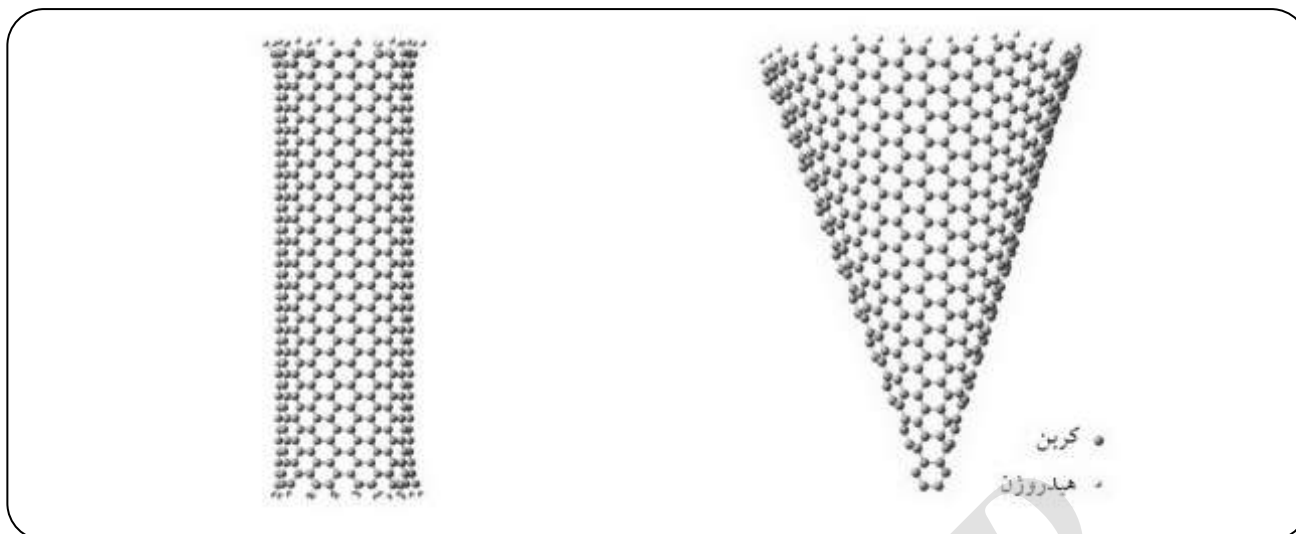
مقدمه

این نانومخروط‌ها به ترتیب نانومخروط 60° ، 120° ، 180° ، 240° ، 300° درجه نامیده می‌شوند [۲، ۳]. نانومخروط‌های کربنی دارای فضای خالی درونی و مساحت سطح بزرگ‌تری نسبت به نانولوله‌های کربنی هستند. این ویژگی نانومخروط‌های کربنی را کاندیداهای مناسب‌تری برای بسیاری از کاربردها از جمله فرایندهای جذب سطحی و ذخیره‌سازی گاز نموده است. در سال‌های اخیر جذب و تفکیک گازهای گوناگون روی نانومخروط‌ها و نانولوله‌های کربنی و غیرکربنی به صورت تجربی بررسی شده است [۴ - ۸]. نتیجه‌ها نشان دهنده ظرفیت ذخیره‌سازی و توان جداسازی گاز بالای این نانوساختارهای کربنی است.

چند سال پس از کشف نانولوله‌های کربنی به‌وسیله ایچیمیا [۱]، نوع دیگری از نانوساختارهای کربنی به نام نانومخروط‌های کربنی دیده شدند. یک صفحه گرافن را به شش بخش همانند تقسیم کرده، به گونه‌ای که هر بخش شامل یکی از شش کربن گوشه شش ضلعی کربنی در صفحه گرافن باشند. با حذف یک یا تعداد بیش‌تری از این بخش‌ها و پیچاندن باقی مانده صفحه گرافن می‌توان یک نانومخروط کربنی ایجاد نمود [۲]. نانومخروط‌ها بر اساس زاویه بخش حذف شده از صفحه گرافن برای ساخت مخروط، دسته‌بندی و نامگذاری می‌شوند. زاویه رأس نانومخلوط کربنی می‌تواند 60° ، 120° ، 180° ، 240° ، 300° درجه باشد.

*عقد دار مکاتبات

+E-mail: royamajidi@gmail.com ; r.majidi@sru.ac.ir



شکل ۱- ساختار (الف) نانومخلوط 240° و (ب) نانولوله کربنی (۱۰،۱۰).

نانولوله کربنی هستند. جرم گاز، اتم کربن و هیدروژن به ترتیب با m_C ، m_{gas} و m_H نشان داده شده‌اند.

در شکل ۱، نانومخلوط کربنی 240° و نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) نشان داده شده‌اند. نانومخلوط کربنی به طول 48 \AA با 800 اتم کربن انتخاب شده‌اند. شعاع نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) 6.78 \AA محاسبه شده است. نانومخلوط کربنی 240° دارای شعاع میانگین 6.9 \AA است. در واقع نانومخلوط و نانولوله کربنی به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که شعاع میانگین آنها نزدیک به یکدیگر باشد.

نانومخلوط و نانولوله کربنی در وسط جعبه‌های شبیه‌سازی با حجم برابر با $200 \times 200 \times 200 \text{ \AA}^3$ قرار داده شده‌اند. در مرحله‌های گوناگون شبیه‌سازی تعداد مولکول‌های گاز از 20 تا 2300 مولکول افزایش یافته است. شرایط مرزی دوره‌ای در هر سه بعد اعمال شده است. برای به تعادل رساندن سامانه و تعیین مقدار جذب، شبیه‌سازی‌ها باید تا زمانی که مقدار جذب ثابت شود، ادامه یابد. شبیه‌سازی‌ها صد پیکو ثانیه با گام زمانی یک فمتوثانیه انجام شده‌اند.

نتیجه‌های شبیه‌سازی‌ها

نخست جذب اکسیژن خالص و نیتروژن خالص و سپس مخلوط این دو گاز در فشارهای گوناگون مطالعه شد. در اینجا مخلوط گاز اکسیژن و نیتروژن به دو صورت در نظر گرفته شد: ۱- مخلوط گاز اکسیژن و نیتروژن با نسبت برابر و ۲- ترکیب هوا (۷۸ درصد نیتروژن و ۲۲ درصد اکسیژن).

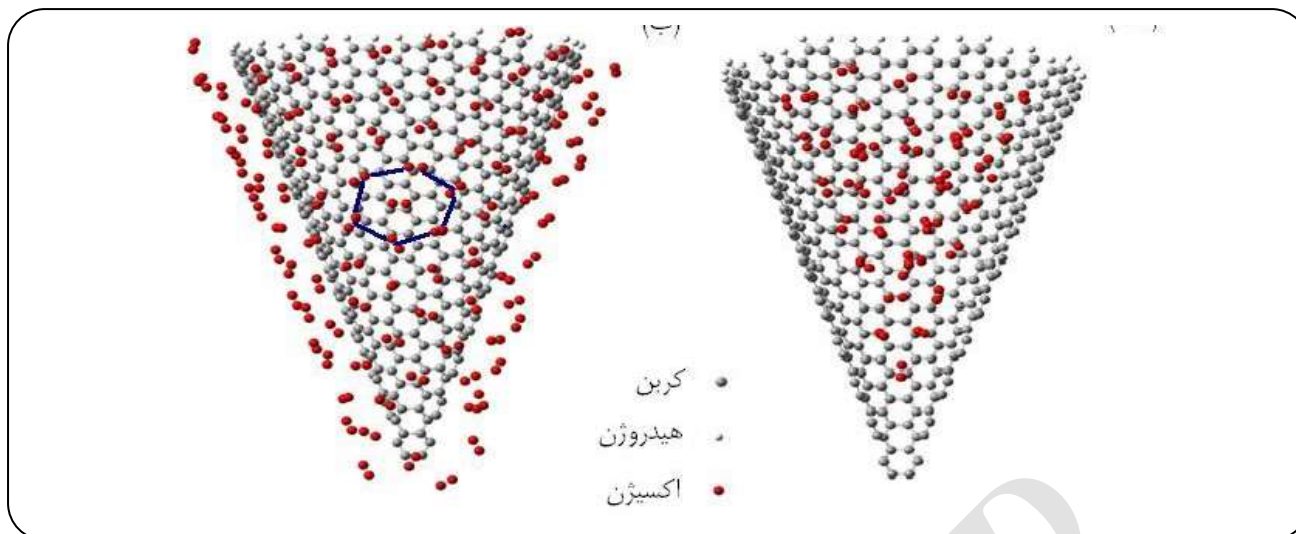
در سال‌های اخیر از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به عنوان ابزار قدرتمندی برای بررسی رفتار جذب فیزیکی گازها در در دما و فشارهای گوناگون استفاده شده است [۱۹ - ۸]. در اینجا جذب گازهای اکسیژن خالص، نیتروژن خالص، مخلوط اکسیژن و نیتروژن و هوا روی نانومخلوط و نانولوله کربنی با روش دینامیک مولکولی مطالعه شده است.

روش شبیه‌سازی و معرفی سامانه

جذب گازهای اکسیژن و نیتروژن به صورت جداگانه و مخلوط با یکدیگر روی نانومخلوط و نانولوله کربنی با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، در هنگرد NVT بررسی شده است. شبیه‌سازی‌ها با نرم‌افزار Tinker انجام شده‌اند [۲۰]. برای تعیین برهم‌کنش‌ها از پتانسیل $mm3$ استفاده شده است. تعیین کمیت‌های فیزیکی مانند مکان و سرعت با الگوریتم بیمن تعیین شده‌اند [۲۱]. دمای سیستم با استفاده از ترموستات نوز - هور تنظیم شده است. مقدار جذب گاز با استفاده از تعداد مولکول‌های گاز جذب شده n_{gas} به تعداد اتم‌های کربن n_C نانوساختارهای کربنی یعنی به صورت n_{gas} / n_C محاسبه شده است. ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی با معادله زیر محاسبه شده است [۲۲]:

$$\rho_w = \frac{n_{gas} m_{gas}}{n_{gas} m_{gas} + n_C m_C + n_H m_H} \quad (1)$$

که n_{gas} تعداد مولکول‌های گاز جذب شده (اکسیژن و نیتروژن)، n_C و n_H تعداد اتم‌های کربن و هیدروژن نانومخلوط و



شکل ۲- جذب مولکول اکسیژن (الف) داخل و (ب) خارج نانومخروط.

نشانه‌گر این است که جذب گاز روی سطح خارجی بیش‌تر از جذب در داخل نانومخروط می‌باشد.

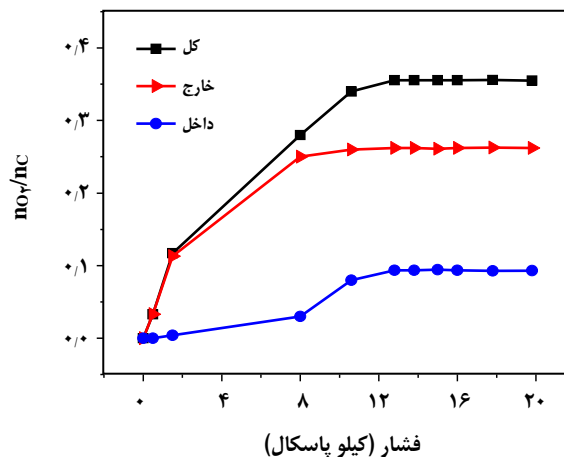
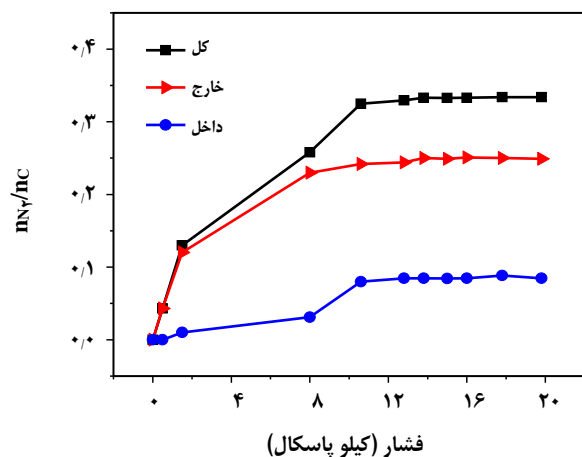
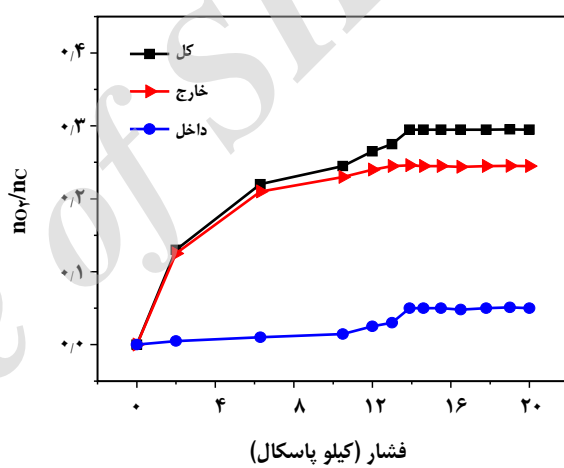
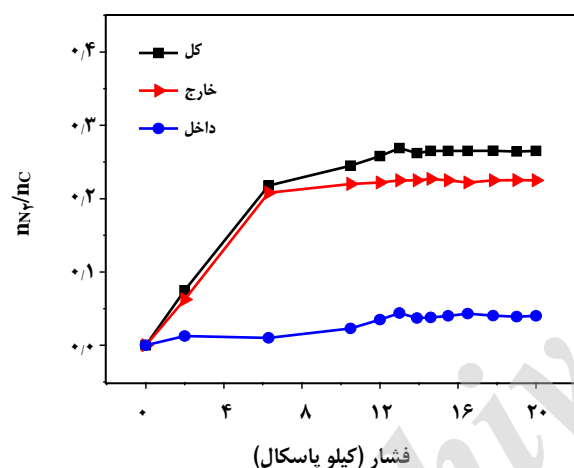
در نمودار ۱ (ب) مقدارهای جذب گاز نیتروژن خالص روی سطح خارجی و فضای داخلی نانومخروط بر حسب فشار در دمای ۳۰۰ کلوین نشان داده شده است. برای گاز نیتروژن خالص بیشینه مقدار جذب در داخل، خارج و کل سطح نانومخروط به ترتیب ۰/۰۸۴، ۰/۲۵ و ۰/۳۳۴ می‌باشد. برای گاز نیتروژن نیز میزان جذب روی سطح خارجی بیش‌تر از فضای داخل نانومخروط گزارش شده است.

مقایسه میزان جذب گازهای اکسیژن و نیتروژن در شرایط یکسان، بیانگر آن است که اگر در جعبه شبیه‌سازی به تعداد مساوی یک بار اکسیژن خالص و بار دیگر نیتروژن خالص قرار دهیم در حالت اشباع میزان اکسیژن جذب شده روی نانومخروط ۲۴۰° بیش‌تر از نیتروژن است. به عبارت دیگر ظرفیت نانومخلوط کربنی برای جذب اکسیژن بیش‌تر از نیتروژن است.

با شرایط یکسان شبیه‌سازی روی نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) انجام گرفته است. در نمودار ۲ مقدارهای جذب گاز اکسیژن خالص و نیتروژن خالص روی سطح خارجی و فضای داخلی نانولوله بر حسب فشار در دمای ۳۰۰ کلوین نشان داده شده است. بیشینه مقدار جذب گاز اکسیژن خالص در داخل و خارج و کل سطح نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) به ترتیب برابر با ۰/۲۴۵، ۰/۲۹۵ و ۰/۲۶۵ می‌باشد. مقدارهای به‌دست آمده نشانگر این است که

نتیجه‌های شبیه‌سازی‌ها بیانگر آن است که در همه موارد ابتدا یک تک لایه از گاز در سطح بیرونی ساختار کربنی شکل گرفته است. سپس اتم‌های گاز فضای متخلخل داخل را پر نموده‌اند. با افزایش پی‌درپی تعداد اتم‌های گاز لایه‌های دیگری از گاز جذب شده در سطح بیرونی شکل گرفته است. در این‌جا تنها لایه اول تعیین‌کننده مقدار گاز جذب شده می‌باشد. به عنوان نمونه، در شکل ۲ تصویر شمایی از مولکول‌های اکسیژن جذب شده روی سطح بیرونی (لایه اول) و فضای داخلی نانومخروط ۲۴۰° نشان داده شده است. همان‌گونه که در شکل ۲ (ب) مشخص شده است، در لایه تشکیل شده روی سطح خارجی نانومخروط مولکول‌های گاز در رأس‌ها و مرکز شش ضلعی‌هایی قرار گرفته‌اند. در مورد نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) نیز گازها به همین صورت روی سطح خارجی و فضای داخلی جذب شده‌اند. جذب هر دو گاز روی نانومخروط و نانولوله کربنی به صورت فیزیکی بوده است.

در نمودار ۱ (الف) مقدارهای جذب گاز اکسیژن خالص روی سطح خارجی و فضای داخلی نانومخروط بر حسب فشار در دمای ۳۰۰ کلوین نشان داده شده است. نتیجه‌ها بیانگر آن است که میزان جذب با افزایش فشار افزایش می‌یابد و سرانجام به شرایط اشباع می‌رسد. این روند افزایش جذب با افزایش فشار در مطالعه‌های پیشین نیز گزارش شده است [۲۳، ۲۲، ۵، ۴]. بیشینه مقدار جذب گاز اکسیژن خالص در داخل، خارج و کل سطح نانومخروط به ترتیب ۰/۰۹۳، ۰/۲۶۲ و ۰/۳۵۵ است. مقدارهای به‌دست آمده

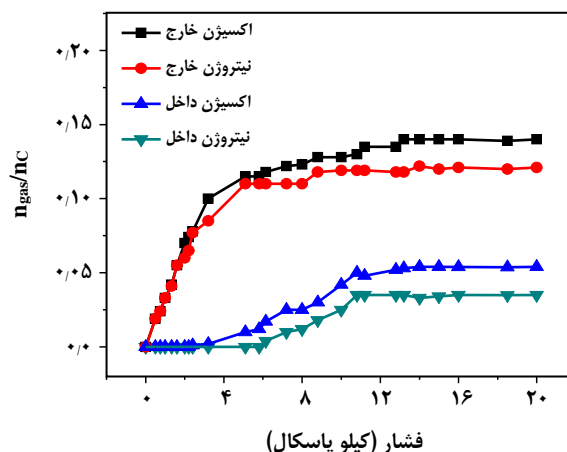
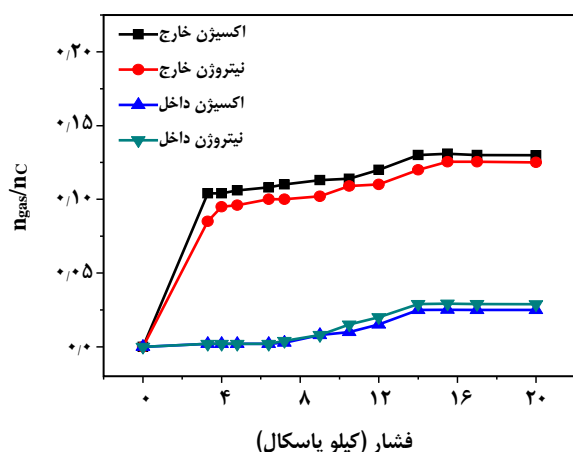
نمودار ۱- میزان جذب گاز (الف) اکسیژن و (ب) نیتروژن خالص در نانومخروط کربنی 240° .

نمودار ۲- میزان جذب گاز (الف) اکسیژن و (ب) نیتروژن خالص در نانولوله کربنی.

بیش تری به جذب در محل های نوک تیز دارند. به این ترتیب درون نانومخروط فضای مناسبی برای ذخیره سازی گاز می باشد. همچنین مساحت سطح خارجی نانومخروط کربنی 240° نسبت به نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) بیش تر است، از این رو انتظار می رود مقدار گاز جذب شده روی سطح خارجی نانومخروط بیش تر از نانولوله کربنی باشد. نتیجه های شبیه سازی ها هم گویای این مطلب است. مقایسه مقادیرهای جذب گاز روی نانومخروط و نانولوله کربنی (جدول ۱) نشان می دهد که نانومخروط کربنی 240° ظرفیت بیش تری برای جذب و ذخیره سازی گاز نسبت به نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) دارد. در هر دو ساختار اکسیژن بیش تر از نیتروژن جذب شده است.

جذب گاز روی سطح خارجی بیش تر از داخل نانولوله می باشد. همچنین اگر در جعبه شبیه سازی به تعداد مساوی یک بار اکسیژن خالص و بار دیگر نیتروژن خالص قرار دهیم، میزان اکسیژن جذب شده روی نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) بیش تر از نیتروژن است. این نتیجه همخوانی خوبی با نتیجه های مطالعه های پیشین دارد [۲۲].

با توجه به اینکه نانومخروط کربنی از دهانه بازتری نسبت به نانولوله کربنی برخوردار است و همچنین حجم فضای خالی درونی نانومخروط بیش از نانولوله کربنی است، امکان جذب گاز داخل نانومخروط بیش تر از نانولوله کربنی بوده است. همچنین همان گونه که در مطالعه های پیشین نیز گزارش شده است، گازها تمایل



نمودار ۳- میزان جذب مخلوط گاز اکسیژن و نیتروژن در (الف) نانومخروط و (ب) نانولوله کربنی.

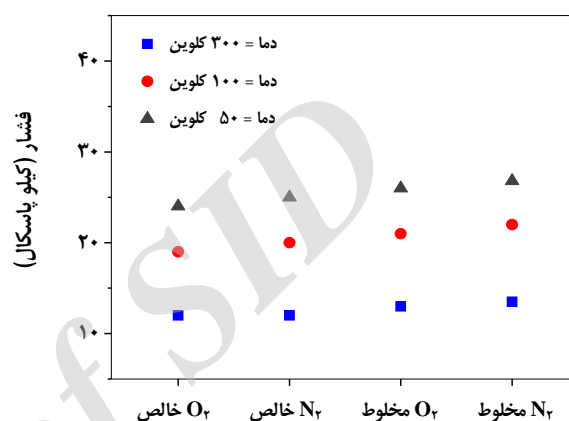
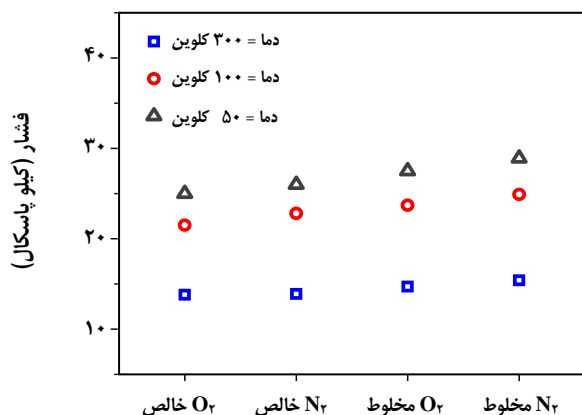
صورت گرفته و مقدار گاز جذب شده به مقدار بیشینه رسیده است. همان‌گونه که در نمودارهای ۱ و ۳ دیده می‌شود، با اشباع شدن سطح خارجی و فضای داخلی نانومخروط و نانولوله کربنی از گازهای جذب شده، افزایش فشار تأثیری روی مقدار گاز جذب شده ندارد. مقدار فشار بهینه برای اشباع گاز جذب شده روی نانومخروط و نانولوله کربنی در دماهای گوناگون در نمودار ۴ آورده شده است. فشار بهینه با کاهش دما افزایش یافته است. از آنجا که کاهش دما باعث کاهش مقدار گاز جذب شده است، برای رسیدن به شرایط اشباع در دماهای پایین‌تر باید فشار افزایش یابد. به این ترتیب با کاهش دما، اشباع در فشارهای بالاتر اتفاق افتاده است. در پایان به منظور بررسی امکان جداسازی اکسیژن و نیتروژن موجود در هوا توسط نانوساختارهای کربنی، جذب هوا در نانومخروط و نانولوله کربنی بررسی شده است. در جعبه شبیه‌سازی مخلوطی از گازهای اکسیژن (۲۲ درصد) و نیتروژن (۷۸ درصد) در نظر گرفته شده است. برای تشخیص جداسازی گازهای موجود در هوا و مقایسه مقدار جذب اکسیژن و نیتروژن موجود در هوا از فاکتور جداسازی S (نسبت مقدار نیتروژن جذب شده به مقدار اکسیژن جذب شده) استفاده می‌شود. اگر $S=3/76$ باشد، جداسازی اکسیژن و نیتروژن صورت نگرفته است. اگر $S>3/76$ باشد، نیتروژن بیش از اکسیژن و اگر $S<3/76$ باشد، اکسیژن بیش از نیتروژن جذب شده است. در مطالعه‌های پیشین فاکتور جدایی برای نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) کمتر از $3/76$ گزارش شده است [۱۲]. مقدار اکسیژن و نیتروژن جذب شده در نانولوله کربنی به ترتیب $0/23$ و $0/71$ است (جدول ۱). بنابراین نانولوله کربنی

پس از بررسی گازهای اکسیژن و نیتروژن به صورت خالص، این دو گاز با نسبت برابر با یکدیگر مخلوط شده‌اند. برای این مخلوط گاز، میزان اکسیژن و نیتروژن جذب شده روی نانومخروط 240° و نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) محاسبه و در نمودار ۳ نشان داده شده است. میزان جذب با افزایش فشار افزایش یافته به حالت اشباع رسیده است. نتیجه‌ها نشان دهنده جذب بیش‌تر اکسیژن نسبت به نیتروژن است. بیشینه مقدار جذب اکسیژن و نیتروژن روی کل سطح نانومخروط به ترتیب $0/191$ و $0/156$ و در نانولوله $0/16$ و $0/125$ می‌باشد. مقدارهای جذب گاز نشان دهنده ظرفیت بیش‌تر نانومخروط 240° نسبت به نانولوله کربنی برای جذب و ذخیره‌سازی گاز است. همان‌گونه که اشاره شد فضای خالی درونی و مساحت سطح خارجی بیش‌تر نانومخروط کربنی نسبت به نانولوله کربنی عامل بیش‌تر بودن مقدار جذب گاز در نانومخروط کربنی می‌باشد. در این حالت نیز اکسیژن بیش از نیتروژن جذب شده است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که می‌توان از نانومخروط و نانولوله کربنی برای ذخیره‌سازی اکسیژن و جداسازی آن از نیتروژن استفاده نمود.

برای تعیین اثر دما روی مقدار بیشینه گاز جذب شده و فشار بهینه برای رسیدن به شرایط اشباع، جذب اکسیژن و نیتروژن خالص و مخلوط روی نانومخروط و نانولوله کربنی در دماهای 50 و 100 کلوین نیز بررسی شده‌اند. نتیجه‌ها نشان می‌دهد که مقدار گاز جذب شده با کاهش دما کاهش یافته است. در واقع کاهش انرژی جنبشی گاز با کاهش دما باعث کاهش تعداد گاز جذب شده شده است. فشار بهینه، فشاری تعریف شده است که در آن اشباع

جدول ۱- مقدار بیشینه جذب و ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی نانومخروط و نانولوله کربنی در دمای ۳۰۰ کلوین.

هوا		مخلوط		خالص		سیستم	کمیت
N _۲	O _۲	N _۲	O _۲	N _۲	O _۲		
۰٫۱۰۰	۰٫۲۷۵	۰٫۱۵۶	۰٫۱۹۱	۰٫۳۳۴	۰٫۳۵۵	نانومخروط	مقدار بیشینه جذب
۰٫۰۷۱	۰٫۲۳۰	۰٫۱۲۵	۰٫۱۶	۰٫۲۶۵	۰٫۲۹۵	نانولوله	
۰٫۱۹	۰٫۴۲	۰٫۲۷	۰٫۳۴	۰٫۴۴	۰٫۴۸	نانومخروط	ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی
۰٫۱۴	۰٫۳۷	۰٫۲۲	۰٫۳۰	۰٫۳۸	۰٫۴۴	نانولوله	



نمودار ۴- فشار بهینه برای اشباع گاز جذب شده در (الف) نانومخروط و (ب) نانولوله کربنی در دماهای گوناگون.

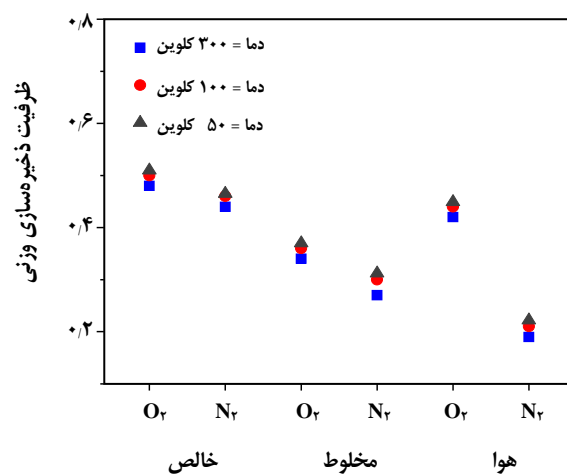
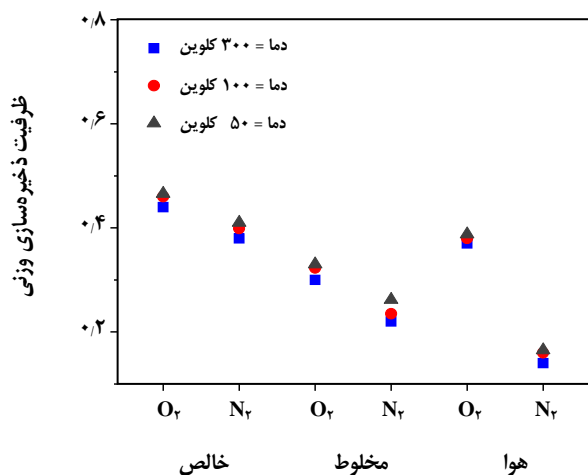
به منظور بررسی اثر دما، ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی نانومخروط و نانولوله کربنی در دماهای ۵۰ و ۱۰۰ کلوین محاسبه و با مقدار ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی در دمای ۳۰۰ کلوین مقایسه شده است. ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی نانومخروط و نانولوله کربنی در دماهای گوناگون برای گازهای اکسیژن و نیتروژن در شرایط گوناگون شبیه‌سازی در نمودار ۵ آورده شده است. در نمودار دیده می‌شود که با افزایش دما ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی کاهش یافته است. علت کاهش ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی، کاهش تعداد اکسیژن و نیتروژن جذب شده با کاهش دما است. در همه دماها ظرفیت ذخیره‌سازی مربوط به اکسیژن بیش از نیتروژن است.

نتیجه‌گیری

جذب گازهای اکسیژن و نیتروژن بصورت خالص و مخلوط با یکدیگر در نانومخروط ۲۴۰° و نانولوله کربنی (۱۰ و ۱۰۰) در دماهای ۵۰، ۱۰۰ و ۳۰۰ کلوین با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مطالعه شده است. مقدار گاز جذب شده، فشار بهینه و ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی محاسبه شده‌اند. نتیجه‌های شبیه‌سازی‌ها

تأیید به جذب بیش‌تر اکسیژن دارد. نتیجه‌ها همچنین نشان می‌دهد که میزان اکسیژن جذب شده در نانومخروط (۰٫۲۷۵) و بیش از نیتروژن جذب شده (۰٫۱) است (جدول ۱). بنابراین فاکتور جداسازی (۲٫۷۵) برای نانومخروط کربنی ۲٫۷۵ و برای نانولوله کربنی ۳٫۲۳ هستند. فاکتور جداسازی هر دو نانو ساختار کربنی کوچکتر از ۳٫۷۶ می‌باشد. این نتیجه حاکی از آن است که می‌توان از نانومخروط کربنی همچون نانولوله کربنی برای تفکیک اکسیژن از نیتروژن موجود در هوا استفاده نمود.

ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی نانومخروط و نانولوله کربنی محاسبه و نتیجه‌ها در جدول ۱ جمع‌آوری شده است. نتیجه‌ها حاکی از آن است که ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی نانومخروط از نانولوله کربنی بیش‌تر است. همچنین هر دو ساختار دارای ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی بیش‌تری برای جذب اکسیژن نسبت به نیتروژن هستند. همان‌گونه که در جدول دیده می‌شود مقدار بیشینه جذب و ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی نانومخروط کربنی برای جذب اکسیژن موجود در هوا چشمگیر است. این نتیجه تأیید می‌نماید که نانومخروط کربنی برای ذخیره‌سازی اکسیژن مناسب هستند.



نمودار ۵ - ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی (الف) نانومخروط و (ب) نانولوله کربنی در دماهای گوناگون.

نانولوله تک دیواره (۱۰ و ۱۰) است. محاسبه فاکتور جداسازی برای نانومخروط و نانولوله کربنی بیانگر آن است که می‌توان با استفاده از این نانوساختارها اکسیژن موجود در هوا را از نیتروژن جدا نمود. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که نانومخروط‌ها به دلیل ساختار ویژه همچون نانولوله‌های کربنی، کاندیدهای مناسبی برای ذخیره‌سازی گاز و جداسازی اکسیژن از نیتروژن هستند.

بیانگر جذب گاز در فضای خالی داخل و سطح خارجی این نانوساختارهای کربنی می‌باشد. جذب گاز روی سطح خارجی هر دو ساختار کربنی بیش‌تر از فضای داخلی است. اکسیژن در هر دو ساختار بیش‌تر از نیتروژن جذب شده است. کاهش دما باعث افزایش فشار بهینه، کاهش مقدار گاز جذب شده و ظرفیت ذخیره‌سازی وزنی است. با توجه به اینکه نانومخروط کربنی دارای سطح خارجی و فضای خالی داخلی بیش‌تری نسبت به نانولوله کربنی است، مقدار بیشینه جذب و ظرفیت ذخیره‌سازی نانومخروط 240° بیش‌تر از

تاریخ دریافت: ۱۳۹۴/۸/۲۰؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۶/۱/۲۱

مراجع

- [1] Iijima S., *Helical Microtubules of Graphitic Carbon*, *Nature*, **354**: 56-58 (1991).
- [2] Chen J.L., Su M.H., Hwang C.C., Lu J.M., Tsai C.C., *Low-Energy Electronic States of Carbon Nanocones in an Electric Field*, *Nano. Micro. Lett.*, **2**: 121-125 (2010).
- [3] Krishnan A., Dujardin E., Treacy M.M.J., Huggdahl J., Lynum S., Ebbesen T.W., *Graphitic Cones and the Nucleation of Curved Carbon Surfaces*, *Nature*, **388**: 451-454 (1997).
- [4] Rasoolzadeh M., Fatemi S., Gholamhosseini M. Moosaviyan M.A., *Study of Methane Storage and Adsorption Equilibria in Multi-Walled Carbon Nanotubes*, *Iran. J. Chem. Chem. Eng. (IJCCE)*, **27**(3): 127-134 (2008).
- [5] Zambano A.J., Talapatra S., Lafdi K., Takashi K., *Adsorbate Binding Energy and Adsorption Capacity of Xenon on Carbon Nanohorns*, *Nanotechnology*, **13**: 201-204 (2012).
- [6] Cabria I., Lopez M.J., Alonso J.A., *The Optimum Average Nanopore Size for Hydrogen Storage in Carbon Nanoporous Materials*, *Carbon*, **45**: 2649-2658 (2007).

- [۷] بلبل امیری، محدثه؛ ارشدی، ستار؛ عزیزی، زهرا؛ بررسی برهم کنش گاز خردل بر روی نانولوله های آلومینیوم – نیتريد زيگزاگ (۴،۰)، (۵،۰) و (۶،۰)، نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، (۴) ۳۳: ۳۱ تا ۴۱ (۱۳۹۳).
- [8] Lithoxoos G.P., Labropoulos A., Peristeras L.D., Kanellopoulos N., Samios J., Economou I.G., Adsorption of N₂, CH₄, CO and CO₂ Gases in Single Walled Carbon Nanotubes: a Combined Experimental and Monte Carlo Molecular Simulation Study, *J. Supercritical Fluids*, **55**: 510-523 (2010).
- [9] Majidi R., Ghafoori T., Study of Neon Adsorption on Carbon Nanocones Using Molecular Dynamics Simulation, *Physica B*, **405**: 2144-2148 (2010).
- [10] Majidi R., Helium Adsorption on Carbon Nanocones with Different Disclination Angle: Molecular Dynamics Simulation, *Nano Brief Reports and Reviews*, **7**: 1250023 (1-5) (2012).
- [11] Majidi R., Taghiyari H.R., Ekhlasi M., Adsorption Patterns of Helium on Carbon and Cellulose Nanotubes: Molecular Dynamics Simulations, *Nano Brief Reports and Reviews*, **12**: 1750036 (1-11) (2017).
- [12] Gotzias A., Heiberg-Andersen H., Kainourgiakis M.E., Steriotis Th., Grand Canonical Monte Carlo Simulations of Hydrogen Adsorption in Carbon Cones, *Appl. Surf. Sci.*, **256**: 5226-5228 (2010).
- [13] Gotzias A., Heiberg-Andersen H., Kainourgiakis M., Steriotis Th., A Grand Canonical Monte Carlo Study of Hydrogen Adsorption in Carbon Nanohorns and Nanocones at 77 K, *Carbon*, **49**: 2715-2717 (2011).
- [14] Rahimi M., Singh, J.K., Muller-Plathe F., Adsorption and Separation of Binary and Ternary Mixtures of SO₂, CO₂ and N₂ by Ordered Carbon Nanotube Arrays: Grand-Canonical Monte Carlo Simulations, *Phys. Chem. Phys.*, **18**: 4112-4120 (2016).
- [15] Foroutan M., Nasrabadi A.T., Adsorption Behavior of Ternary Mixtures of Noble Gases Inside Single-Walled Carbon Nanotube Bundles, *Chem. Phys. Lett.*, **496**: 213-217 (2010).
- [16] Darvishi M., Foroutan M., Mechanism of Water Separation From a Gaseous Mixture Via Nanoporous Graphene Using Molecular Dynamics Simulation, *RSC Adv.*, **5**: 81282-81294 (2015).
- [17] Sha H., Faller R., Molecular Simulation of Adsorption and Separation of Pure Noble Gases and Noble Gas Mixtures on Single Wall Carbon Nanotubes, *Comp. Mater. Sci.*, **114**: 160-166 (2016).
- [18] Fatemi S.M., Sepehrian H., Arabieh M., Simulation Studies of the Separation of Kr-85 Radionuclide Gas From Nitrogen and Oxygen Across Nanoporous Graphene Membranes in Different Pore Configurations, *Eurp. Phys. J. Plus*, **131**: 131(1)-131(9) (2016).
- [19] Bonakala S., Balasubramanian S., Modelling Gas Adsorption in Porous Solids: Roles of Surface Chemistry and Pore Architecture, *J. Chem. Sci.* **127**: 1687-1699 (2015).

- [20] Ponder J.W., "Tinker: Software Tools for Molecular Design", Version 4.2, Saint Louis. MO. (2001).
- [21] Beeman D., [Some Multistep Methods for Use in Molecular Dynamics Calculations](#), *J. Comp. Phys.* **20**: 130-139 (1976).
- [22] Rafati A.A., Hashemianzadeh S.M., Bolboli Z., Naghshineh N., [Canonical Monte Carlo Simulation of Adsorption of O2 and N2 Mixture on Single Walled Carbon Nanotube at Different Temperatures and Pressures](#), *J. Comp. Chem.*, **31**: 1443-9 (2010).
- [23] Jalili S., Majidi R., [Study of Xe and Kr Adsorption on Open Single-Walled Carbon Nanotubes Using Molecular Dynamics Simulations](#), *Physica E*, **39**: 166-170 (2007).

Archive of SID