شیمی سبز و فناوری های پایدار

مطالعه کوانتومی حذف گازهای گلخانه ای به وسیله نانوساختارهای تک لایه کربنی

حلیمه رجب زاده ارسنجانی[1*] ، حسن حذرخانی[2]

[1] گروه شیمی، واحد دزفول، دانشگاه آزاد اسلامی، دزفول، ایران

[2] گروه شیمی، سازمان پژوهش و برنامه ریزی آموزشی، تهران، ایران

Email: r.rajabzadeh77@gmail.com

چکیده

تولید انبوه گازهای گلخانه ای آنها را تبدیل به مواد آلاینده زیست محیطی نموده است که اثرات زیانباری را نیز بر جای می گذارد. در همین راستا، تحقیق حاضر بنا نهاده شده است تا به طور دقیق و در مقیاس مولکولی- اتمی به بررسی حذف گازهای کربن دی اکسید و کربن مونو کسید به عنوان گازهای گلخانه ای شاخص به وسیله نانوساختار کربنی تک لایه ای شکل یا همان گرافن دوپ شده با سلسیم بپردازد. بدین منظور، محاسبات کوانتومی اجرا گردید تا هم ساختار بهینه هر یک از اجزا به تنهایی و هم در برهمکنش با یکدیگر (گاز-نانوساختار) حاصل آید. به علاوه، انواع انرژی های ساختاری، جذب و سطوح اربیتالی برای این منظور محاسبه شدند. نتایج نشان دادند که فعالیت نانوساختار مورد مطالعه برای حذف هر دو گاز مذکور با قابلیت تشخیص و جذب موثر است. این نانوساختار نسبت به جذب گاز کربن دی اکسید با مقدار انرژی جذب ۰/۱۴۲- الکترون ولت در مقایسه با گاز کربن مونوکسید با مقادیر انرژی جذب ۰/۱۰۲- و ۰/۱۰۹- الکترون ولت گزینشی تر عمل می‌کند. همچنین مقادیر محاسبه شده ۱/۶۵۹، ۱/۶۴۸ و ۱/۶۶۵ الکترون ولت برای گاف انرژی نشان دادند که شناسایی گازهای جذب شده از یکدیگر امکان پذیر است. بدین ترتیب، ایده جذب گازهای گلخانه ای توسط نانوساختارهای تک لایه کربنی مورد بررسی و تایید قرار گرفت.

واژگان کلیدی:نانوساختار، گازهای گلخانه ای، محاسبات کوانتومی،نانو کربن دوپ شده

Quantum study of greenhouse gases removal by monolayer carbon nanostructures

Halimeh Rajabzadeh[1*], Hassan Hazarkhani[2]
[1] Department of Chemistry, Dezful Branch, Islamic Azad University, Dezful, Iran
[2] Department of Chemistry, Educational Research and Planning Organization, Tehran, Iran
[*]Email: r.rajabzadeh77@gmail.com

Abstract

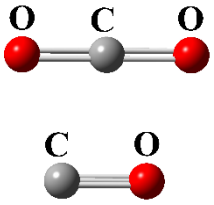
Mass production of greenhouse gases has turned them into environmental pollutants, which also have harmful effects. In this regard, the present study is designed to accurately and on a molecular / atomic scale study the elimination of carbon dioxide and carbon monoxide as indicator greenhouse gases by layered carbon nanostructure or graphene doped with silicon atom. For this purpose, quantum calculations were performed to obtain both the optimal structure of each component alone and in interaction with each other (gas-nanostructure). In addition, the types of structural energies, adsorption and orbital surfaces were calculated for this purpose. The results showed that the activity of the studied nanostructure is effective for the removal of both mentioned gases with the ability of their detection and adsorption. This nanostructure was found more selective for carbon dioxide gas by the adsorption energy of -0.142 eV compared to carbon monoxide gas by the adsorption energies of -0.102 and -0.109 eV. Moreover, the calculated values of 1.659, 1.648 and 1.665 eV for the energy gap showed possibility of recognition of adsorbed gases from each other. Thus, the idea of greenhouse gas uptake by monolayer carbon nanostructures was investigated and confirmed.

Keywords: Nanostructure, Greenhouse gases, Quantum computing, Adsorption

مقدمه

ورود انواع آلاینده ها به محیط زیست،همواره یک خطر جدید در حفظ چرخه های طبیعی است که سبب بر هم خوردن نظم پایدار جوامع امروزی شده است. وجود این آلاینده ها افزون بر آسیب رساندن به سلامت افراد،موجب پوسیدگی سریع تر ساختمان ها و دستگاههای صنعتی و از بین رفتن انواع زیر ساخت ها می شوند. دراین میان،آلاینده های گازی به دلیل انتشارسریع تر وگسترده تر و تاثیرگذاری بر واکنش پذیری سایر مواد،حتی خطرات بیشتری دارند[۱]. گازهای گلخانه ای از جمله این آلاینده های زیان آورهستند که پیوسته بر میزان تولیدآنهاافزوده میشود و مضرات جبران ناپذیری را از خود در محیط بر جای می گذارند[۲]. لذا توسعه راهکارها برای حذف این این گازها از اهمیت بسیاری برخوردار است و تلاش های مبسوطی در این زمینه صورت گرفته است[۳]. گرمایش جهانی، بالا رفتن میانگین دمای کره زمین، رقیق شدن و سوراخ شدن لایه ازن، بارش باران های اسیدی، بالا آمدن سطح آبهای آزاد بین المللی و کاهش مساحت سطح برف در نیمکره شمالی همه از جمله مضرات افزایش گازهای گلخانه ای در هوا کره محسوب می شوند[۴]. کربن دی اکسید (CO_2) یکی از مهم ترین گازهای گلخانه ای است که در اثر انواع فعالیت های انسانی و طبیعی تولید می شود. به دلیل اهمیت این گاز، شاخصی به نام ردپای بوم شناختی کربن تعریف شده است که نشان می دهد هر جامعه ای سالانه چه میزان از منابع کره زمین را مصرف کرده و چه تاثیری بر روی کره زمین می گذارد[۵]. کربن دی اکسید، در فرایند تنفس جانداران تولید شده و در فرایند فتوسنتز توسط گیاهان مصرف می شود. البته گیاهان در طول روز از این گاز برای پیشبرد فرآیند فتوسنتز استفاده می کنند، اما در طول شب دوباره منبع تولید این گاز هستند. هر چند میزان گاز کربن دی اکسید تولید شده توسط گیاهان به مراتب کم تر از میزان کربن دی اکسید مصرفی توسط آنهاست. از این رو، گیاهان، درختان و جنگل ها پالاینده های طبیعی درنظر گرفته می شوند[۶]. البته مهم ترین و عظیم ترین منبع تولید کربن دی اکسید، سوخت های فسیلی هستند که به دلیل سوزاندن مقادیر بسیار زیاد از آنها در صنایع گوناگون روزانه حجم انبوهی از گاز کربن دی اکسید وارد هوا کره می شود[۷]. از آن جایی که سوختن ناقص نفت، زغال سنگ و گاز طبیعی سبب تولید گاز کربن مونوکسید می شود، مقادیر قابل توجهی از این گاز هم روزانه در سرتاسر جهان وارد هوا کره می شود. این گاز هم اثر گلخانه ای دارد و هم در کنار گاز کربن دی اکسید و سایر گازهای گلخانه ای خطرات زیست محیطی زیادی برجای می گذارد[۸]. گاز کربن مونو کسید افزون بر اثرگلخانه ای، یک گاز بسیار سمی است که در محیط های بسته سبب مرگ و میر تعداد قابل توجهی از مردم جهان می شود[۹]. بر همین اساس حذف این آلاینده ها یا کاهش آنها در هوا کره میتواند نقش موثری در تنظیم چرخه های طبیعی و حفظ تعادل در پدیده های گوناگون طبیعی داشته باشد. بررسی منابع پژوهشی و تحقیقاتی نشان می دهد که راهکارهای گوناگونی از جمله دفن کربن دی اکسید، به دام انداختن گاز کربن دی اکسید خروجی از نیروگاهها و کاخانه های بزرگ از طریق واکنش دادن این گاز با موادی مانند منیزم اکسید و کلسیم اکسید و تولید مواد آلی از کربن دی اکسید برای حذف و کاهش این آلاینده ها مطرح شده است. به دلیل اهمیت این موضوع، هم چنان یافتن راهکارهای جدید و مناسب برای حذف یا کاهش این آلاینده ها از هواکره در مرکز توجهات و پژوهش های کاربردی است[۴]. در نتیجه همچنان توسعه راهکارهای نوین برای شناسایی و حذف این گازها بسیار حایز اهمیت است. یکی از راهکارهای پیشنهادی طراحی جاذب های مناسب است که می تواند برای رسیدن به اهداف تعیین شده در حوزه گازهای آلاینده راهگشا باشد[۱۰]. در اینجا خاطرنشان می شود که اگرچه کربن دی اکسید تنها گاز گلخانه ای نیست، اما به دلیل تنوع زیاد منابع تولید آن و نیز اثرگذاری مخرب این گاز بر ساختارهای زیست محیطی، بلاشک از مهم ترین گازهای گلخانه ای محسوب می شود[۱۱]. در تحقیق حاضر نیز به طور اخص بر مطالعه چگونگی فرآیند حذف این گاز به وسیله نانوساختارهای کربنی پرداخته شده است.

با ظهور نانوفناوری و توسعه نانوساختارها، مطالعات گسترده ای در راستای توسعه کاربردهای این فناوری و مواد نوین صورت گرفته است[۱۲]. یکی از زمینه های این مطالعات در خصوص بررسی قابلیت سطح مطلوب نانوساختارها در جذب سایر مواد بوده است که در این میان، طراحی نانوجاذب ها برای گازها یکی از موارد قابل توجه است[۱۳]. در واقع، نانوساختارهای کربنی با فراهم کردن سطوح مناسب برای جذب مواد خارجی از جمله گازها،به عنوان جاذب موثر گازها معرفی شدند و تلاش برای توسعه این مواد نوین در کاربرد گسترده تر جاذب همچنان در حال انجام است[۱۴]. در کنار اهمیت و کاربرد حالت های خالص نانوساختارها، حالت های ناخالص آنها نیز در قالب نانوساختارهای دوپ شده با سایر اتم ها از اهمیت بسزایی در فرآیند جذب برخوردار هستند[۱۵]. مطالعات و پژوهش های قبلی نشان دادند که کاربرد سطوح دوپ شده نانوساختارهای کربنی می تواند به پیشبرد بهتر فرآیند جذب سایر مواد کمک کند[۱۶]. البته که پیچیدگی نانوساختارها از یک سو و پیچیده بودن مطالعات سیستم های گازی از سوی دیگر به پیچیده شدن اجرای مطالعات برای طراحی نانوجاذب های گازی منجر می شود. در همین راستا انجام مطالعات کوانتومی می تواند به بررسی دقیق سیستم های مورد مطالعه در مقیاس اتم یا مولکول بپردازد[۱۷]. در این نوع مطالعات، ساختارها از حیث خصوصیات و شکل در کنار ماهیت الکترونی بررسی می شوند تا برای توسعه ایده های طراحی نانو جاذب گازهای گلخانه ای نقش آفرین باشد. در این تحقیق،جذب گازهای کربن دی اکسید و کربن مونوکسید توسط نانو ساختار کربنی لایه ای دوپ شده مورد مطالعه قرار گرفته است.



شکل ۱: ساختارهای شیمیایی مولکول های کربن دی اکسید (شکل بالا) و کربن مونواکسید (شکل پایین).

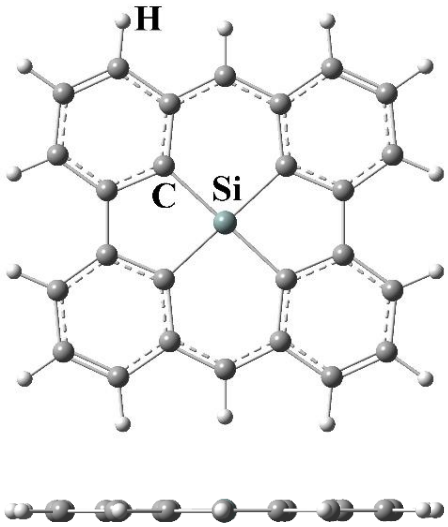
مواد، وسایل و روش ها

مواد و وسایل مورد نیاز برای انجام مطالعات کوانتومی، ساختارهای شیمیایی سه-بُعدی ترسیم شده هستند که در ادامه، محاسبات مورد نیاز روی بهینه سازی آنها برای حصول ساختارهای نهایی انجام خواهند شد. در همین راستا، ساختارهای شیمیایی سه-بُعدی ترسیم شده کربن دی اکسید و کربن مونوکسید (شکل ۱) به عنوان نمونه های شاخص گازهای گلخانه ای مورد استفاده قرار می گیرند. به علاوه، ساختار شیمیایی سه-بُعدی ترسیم شده نانوساختار کربنی لایه ای دوپ شده (شکل ۲) به عنوان نانوجاذب مورد استفاده قرار گرفته است. در ادامه، فرآیند جذب هر یک از این گازها روی نانوجاذب مشخص شده، مطالعه و وبررسی می شود (شکل ۳). ساختارهای بهینه هر یک از ساختارهای شیمایی ترسیم شده تنها، با قرارگیری مختصات هندسی اتم های آنها متناسب با محاسبه انرژی کمینه طی اجرای بهینه سازی کوانتومی به دست می آیند. پس از مهیا کردن ساختارهای بهینه، هر یک از گازها به طور جداگانه و نانوساختارکربنی و هم چنین ترکیب ساختارهای بهینه شده گاز-نانوساختار، مجدد مورد اجرای محاسبات بهینه سازی کوانتومی قرار می گیرند تا فرآیند جذب گاز روی نانوجاذب بررسی شود. جهت اجرای محاسبات کوانتومی از نرم افزار Gaussian و روش و سری پایه B3LYP/6-31G* استفاده شده است[۱۸]. برای ترسیم ساختارهای شیمیایی سه-بُعدی مواد مورد مطالعه، آماده سازی فایل های ورود به محاسبات و استخراج اطلاعات از فایل های خروجی محاسبات از نرم افزار GaussView استفاده شده است[۱۹].

نتایج و بحث

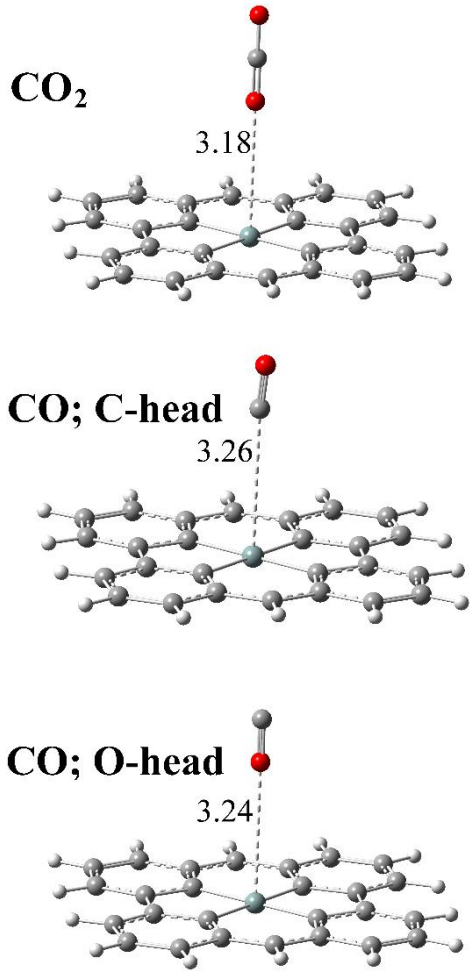
حذف گازهای گلخانه ای به عنوان یک ضرورت در حذف برخی از آلاینده های زیست محیطی همواره مورد توجه بوده است که در این میان، حذف گاز کربن دی اکسید به طور عمده و حذف گاز کربن مونو کسید در کنار آن (شکل ۱) از اهمیت بسزایی برخودار هستند[۲۰و۲۱]. ظهورنانوفناوری نیز محققین را بر آن داشته است تا از این مفهوم نوین فناوری و مواد وابسته به آن در جهت حذف گازها بهره مند شوند.

نانوساختار کربنی لایه ای ملقب به گرافن (شکل ۲) با داشتن سطح گسترده ولایه ای برای این منظور بسیار مفید قلمداد شده است[۲۲].



شکل ۲: ساختار شیمیایی مولکول گرافن دوپ شده با سلسیم در نماهای مختلف.

سطح خالص کربنی نانوساختار لایه ای، یک سطح کاملا یکنواخت از حیث ماهیت اتمی-الکترونی است که با ایجاد سطح غیر یکنواخت به کمک دوپ کردن می توان قابلیت برهمکنشی آن سطح از قبل یکنواخت را افزایش داد. از این رو، وجود ناخالصی ها در قالب اتم های دوپ شده در ساختار اصلی می تواند به مهیا کردن منطقه برهمکنشی ویژه برای سطح اصلی گرافن در قابل سطح دوپ شده جدید گرافن کمک شایانی کند[۲۳]. در این تحقیق، از یک اتم سلسیم (Si) برای دوپ کردن سطح نانوساختار تک لایه کربنی استفاده شده است تا غلظت ناچیز اتم دوپ شده در مقابل اتم های کربن ساختار اصلی محفوظ بماند[۲۴]. مزیت استفاده از سلسیم بدین ترتیب است که با قرار داشتن در گروه کربن در جدول تناوبی، از لایه ظرفیت مبسوط تر و اختلاف الکترونگاتیوی با اتم کربن برخوردار است و می تواند برای ایجاد سطح غیریکنواخت با کمترین تغییر ممکن در ماهیت ساختار اصلی استفاده شود [۲۵]. افزون بر آن، اتم های لبه ای صفحه کربنی با اتم های هیدروژن اشباع شدند تا مسطح بودن سطح محفوظ بماند. بدین ترتیب، نانو ساختار کربنی لایه ای (گرافن) دوپ شده با اتم سلسیم برای جذب هر یک از گازهای کربن دی اکسید و کربن مونو کسید با هدف حذف گازهای گلخانه ای مهیا شده است. لازم به ذکر است که مختصات هندسی هرکدام از ساختارها، تا رسیدن به سطح انرژی کمینه، ابتدا با محاسبات کوانتومی مورد بهینه سازی قرار گرفتند. نتایج این تحقیق در جدول ۱ و شکل های ۱تا ۳ نشان داده شده اند.



شکل ۳: ساختارهای شیمیایی گازهای کربن دی اکسید و کربن مونو کسید جذب شده روی مولکول گرافن دوپ شده با سلسیم؛ اعداد فاصله برهمکنش بر حسب آنگستروم هستند.

با توجه به ساختارهای شیمیایی شکل ۳، مشخص شده است که جذب هر کدام از گازهای کربن دی اکسید و کربن مونو کسید به وسیله نانوساختار کربنی لایه ای یا همان گرافن

امکانپذیر است. مضاف بر اینکه منطقه دوپ شده با سلسیم به عنوان مرکز اصلی برهمکنش صفحه گرافن با هر کدام از گازها محسوب می شود، که به نوعی به اهمیت دوپ شدن در این ساختار اشاره می کند. محاسبات بهینه سازی برای ساختارهای دو جزیی نشان دادند که تنها یک قرارگیری فضایی بهینه برای مولکول کربن دی اکسید بر سطح گرافن محتمل است. حال اینکه، برای مولکول کربن مونو کسید دو حالت بهینه از سر کربن (C-head) و از سر اکسیژن (O-head) محتمل است. بر اساس فاصله بین اجزای برهمکنش کننده، جذب کربن دی اکسید نسبت به کربن مونو کسید توسط نانوساختار مورد مطالعه محتمل تر است. در خصوص جذب کربن مونوکسید نیز، جذب از سر اکسیژنی نسبت به جذب از سر کربنی محتمل تر است. برای بررسی دقیق تر این موضوع و ارزیابی میزان قدرت جذب، انرژی های محاسبه شده مورد استفاده قرار می گیرند (جدول ۱).

جدول ۱: مقادیر انرژی امحاسبه شده برای ساختارها*

کمیت	CO_2-Nano	CO-Nano (C-head)	CO-Nano (O-head)
انرژی کل	-۴۰۱۹۸/۵۳۴	-۳۸۱۵۰/۲۵۲	-۳۸۱۵۰/۲۵۹
انرژی جذب	-۰/۱۴۲	-۰/۱۰۲	-۰/۱۰۹
هومو	-۴/۷۲۳	-۴/۷۱۷	-۴/۷۴۴
لومو	-۳/۰۶۴	-۳/۰۶۹	-۳/۰۷۹
گاف انرژی	۱/۶۵۹	۱/۶۴۸	۱/۶۶۵

*همه انرژی ها بر اساس الکترون ولت هستند.

همانطور که در جدول ۱ مشخص شده است، مقادیر مختلف انرژی های محاسبه شده برای بررسی میزان قدرت جذب هر کدام از گازها توسط نانوساختار مورد سنجش قرار گرفتند. منظور از انرژی کل برای انرژی مجموع ساختارهای کمپلکس گاز و نانوساختار است. حال اینکه برای به دست آوردن انرژی جذب، لازم است که انرژی کل از انرژی هر کدام از ساختارهای تنها کسر شود تا تفاضل این مقدار منجر به انرژی جذب شود. نکته قابل توجه در خصوص انرژی اربیتال های مولکولی این است که بالاترین اربیتال مولکولی پر از الکترون با هومو (HOMO) و پایین ترین اربیتال مولکولی خالی از الکترون با لومو (LUMO) مشخص شده است. خاطرنشان می شود که معیار بالا و پایین بودن بر اساس مقدار انرژی است و اختلاف این دو سطح انرژی اربیتالی در قالب گاف انرژی قابل بررسی است.

با توجه به نتایج به دست آمده در خصوص جذب هر یک از گازهای مورد مطالعه به وسیله نانوساختار کربنی لایه ای دوپ شده با سلسیم (شکل ۳)، ایده جذب گازهای کربن دی اکسید و کربن مونو کسید به وسیله این نانوساختار تایید می شود. برای بررسی دقیق تر جزییات، کمیت های انرژی (جدول ۱) نشان دادند که میزان جذب کربن دی اکسید از همه موثر تر است و مقدار ۱۴۲/- الکترون ولت حاصل از برهمکنش بین دو جزء گاز کربن دی اکسید و نانوساختار است. منفی بودن علامت انرژی گویای انرژی زا بودن این برهمکنش است که از حیث تغییرات انرژی در پیشبرد واکنش موثر است. همانطور که از مختصات برهمکنشی بین دو جزء پیداست، فاصله بین کربن دی اکسید و نانوساختار از فاصله هر کدام از سر کربن یا سر اکسیژن کربن مونو کسید با نانوساختار کوتاه تر است. مقادیر انرژی جذب به دست آمده نیز گویای همین برتری جذب کربن دی اکسید به وسیله نانوساختار نسبت به جذب کربن مونو کسید بود. در اینجا می توان به گزینش پذیری نانوساختار مورد مطالعه نسبت به جذب گازها نیز اشاره کرد. در ادامه، مقادیر انرژی جذب برای از سر کربن و از سر اکسیژن کربن مونو کسید به وسیله نانوساختار به ترتیب ۰/۱۰۲- و ۰/۱۰۹- الکترون ولت به دست امدند که در مقایسه با جذب کربن دی اکسید توسط نانوساختار کمتر هستند. به علاوه، سر اکسیژن کربن مونوکسید برای جذب شدن توسط نانوساختار از حیث انرژی مطلوب تر می باشد. این مشاهده در موافقت با مشاهده قبلی برای فاصله کوتاه تر بین سر اکسیژن با نانوساختار در مقایسه با سر کربن با نانوساختار است. بدین ترتیب از حیث انرژی های جذب، فرآیند جذب هر دو گاز به صورت انرژی زا بوده و از نگاه تغییرات انرژی مطلوب است.

علاوه بر مقادیر انرژی ساختاری، انرژی مربوط به سطوح اربیتال مولکولی نیز در بررسی فرآیندهای جذب بسیار ضرورت دارد. همانطور که از جدول ۱ مشاهده می شود،

سطوح اربیتالی هومو و لومو در ترکیبات مختلف تغییر کردند و به واسطه این تغییرات، مقادیر گاف انرژی متفاوتی به دست آمد. اهمیت تغییرات سطوح اربیتال مولکولی به اهمیت نحوه واکنش پذیری هر یک از مولکول ها با نانوساختار اشاره دارد که اختلاف بین سطوح اربیتالی در قالب کمیت گاف انرژی امکان تشخیص گاز جذب شده روی نانوساختار را فراهم می سازد. در واقع، عملکرد تشخیصی وجود یک گاز به کمک نانوساختار و بر اساس تغییرات گاف انرژی قابل بررسی بوده و در ادامه فرآیند جذب آن با توجه به مقادیر انرژی جذب قابل بررسی است. در واقع اجرای چنین مطالعاتی به قابلیت دوگانه تشخیصی حذفی نانوساختارها برای جذب سایر مولکول ها اشاره دارد.

همانطور که قبلا اشاره شد، نانوساختارها با مهیا کردن سطوح مناسب برای برهمکنش با سایر مواد، در جذب آنها موثر هستند. در خصوص نشان دادن اهمیت و کارآیی جایگاه دوپ شده نانوساختار تک لایه کربنی با سلسیم در جذب گاز مشخص شده است که ترجیح مولکول های گازی به شرکت کردن در برهمکنش با جایگاه دوپ شده است و با سایر قسمت های نانوساختار وارد برهمکنش نمی شوند. لذا این مشاهده در کنار سایر کمیت های محاسبه شده موید کارآیی نانوساختار تک لایه کربنی دوپ شده با سلسیم برای جذب هر یک از مولکول های گازی دی اکسید کربن و مونو اکسید کربن است. در همین راستا، کمیت های انرژی جذب و انرژی های اربیتالی، به ویژه گاف انرژی، نمایانگر کاربرد مطلوب نانوساختارها برای منظور از پیش تعیین شده جذب گاز هستند. وجود هر کدام از گازهای دی اکسید کربن و کربن مونو کسید در محیط، می تواند توسط نانو ساختار کربنی لایه ای دوپ شده با سیلسیم تشخص داده شده و جذب شوند. اهمیت زیست محیطی این موضوع به مضرات وجود گازهای گازهای گلخانه ای بر می گردد که حذف آنها از محیط یک ضرورت به حساب می آید.

نتیجه گیری

در این مطالعه که با اجرای محاسبات کوانتومی انجام شد، جذب گازهای گلخانه ای شاخص یعنی کربن دی اکسید و کربن مونو کسید توسط نانوساختار کربنی لایه ای شکل یا همان گرافن دوپ شده با سیلسیم مورد تحقیق قرار گرفت. نتایج حاصل از محاسبات نشان دادند که انرژی جذب هر کدام از گازها با نانوساختار از علامت منفی برخوردار است که این موضوع موید انرژی زا بودن فرآیند جذب گازها توسط نانوساختار مورد مطالعه می باشد. مضاف بر اینکه مختصات بهینه شده نشان دادند که اتم دوپ شده سیلسیم نقش کلیدی در برقرار فرآیند جذب هر دو گاز مورد مطالعه ایفا می کند. علاوه بر مختصات بهینه شده و مقادیر انرژی ساختاری محاسبه شده، مقادیر انرژی اربیتال های مولکولی نیز تغییرات سطوح اربیتالی را در سیستم های جذب شده گاز-نانوساختار نشان دادند که به عملکرد تشخیصی نانوساختار برای تشخیص وجود هر کدام از گازهای مورد مطالعه اشاره می کند. مقادیر گاف انرژی و تغییرات آنها در مدل های مختلف جذب گاز به عملکرد تشخیصی نانوساختار کمک می کند. بنابراین با توجه به نتایج به دست آمده، هر کدام از گازهای کربن دی اکسید و کربن مونو کسید، البته با مطلوبیت بیشتر برای کربن دی اکسید، توسط نانوساختار کربنی لایه ای شکل دوپ شده با سیلسیم قابل تشخیص و جذب شدن هستند که در حذف این گازهای گلخانه ای شاخص بسیار موثر هستند.

منابع

[1] Ravindra K., Rattan P., Mor S., Aggarwal A.N., Generalized additive models: building evidence of air pollution, climate change and human health, *Environment International*. **2019**, 132, 104987.

[2] Mikhaylov A., Moiseev N., Aleshin K., Burkhardt T., Global climate change and greenhouse effect, *Entrepreneurship and Sustainability Issues*. **2020**,7, 2897.

[3] Goglio P., Williams AG., Balta-Ozkan N., Harris NR., Williamson P., Huisingh D., Zhang Z., Tavoni M., Advances and challenges of life cycle assessment (LCA) of greenhouse gas removal technologies to fight climate changes, *Journal of Cleaner Production*. **2020**, 244, 118896.

[4] Smith P., Adams J., Beerling DJ., Beringer T., Calvin KV., Fuss S., Griscom B., Hagemann N., Kammann C., Kraxner F., Minx JC., Land-management options for greenhouse gas removal and their impacts on ecosystem services and the sustainable development goals, *Annual Review of Environment and Resources*. **2019**, 44, 255.

[5] Nguyen TK., Ngo HH., Guo W., Chang SW., Nguyen DD., Nghiem LD., Liu Y., Ni B., Hai FI., Insight into greenhouse gases emissions from the two popular treatment technologies in municipal wastewater treatment processes, *Science of the Total Environment*. **2019**, 671, 1302-13.

[6] Woźniak Ł., Połaska M., Marszałek K., Skąpska S., Photosensitizing furocoumarins: content in plant matrices and kinetics of supercritical carbon dioxide extraction, *Molecules*. **2020**, 25, 3805.

[7] Kotcher J., Maibach E., Choi WT., Fossil fuels are harming our brains: identifying key messages about the health effects of air pollution from fossil fuels, *BMC Public Health*. **2019**, 19, 1-2.

[8] Matsunaga T., Morino I., Yoshida Y., Saito M., Noda H., Ohyama H., Niwa Y., Yashiro H., Hirata R., Kamei A., Kawazoe F., Recent global distributions of greenhouse gases, carbon monoxide, and solar-induced chlorophyll fluorescence as seen from GOSAT-2, *AGU Fall Meeting Abstracts*. **2020**, 2020, A241-04.

[9] Abed KA., El Morsi AK., Sayed MM., El Shaib AA., Gad MS., Effect of waste cooking-oil biodiesel on performance and exhaust emissions of a diesel engine, *Egyptian Journal of Petroleum*. **2018**, 27, 985-9.

[10] Lomax G., Workman M., Lenton T., Shah N., Reframing the policy approach to greenhouse gas removal technologies, *Energy Policy*. **2015**, 78, 125-36.

[11] Forster J., Vaughan NE., Gough C., Lorenzoni I., Chilvers J., Mapping feasibilities of greenhouse gas removal: key issues, gaps and opening up assessments, *Global Environmental Change*. **2020**, 63, 102073.

[12] Nasrollahzadeh M., Sajadi SM., Sajjadi M., Issaabadi Z., Applications of nanotechnology in daily life, *Interface Science and Technology*. **2019**, 28, 113-43.

[13] Liao MH., Chen DH., Preparation and characterization of a novel magnetic nano-adsorbent, *Journal of Materials Chemistry*. **2002**, 12, 3654-9.

[14] Lamy-Mendes A., Silva RF., Durães L., Advances in carbon nanostructure–silica aerogel composites: a review, *Journal of Materials Chemistry A*. **2018**, 6, 1340-69.

[15] Han ZJ., Huang C., Meysami SS., Piche D., Seo DH., Pineda S., Murdock AT., Bruce PS., Grant PS., Grobert N., High-frequency supercapacitors based on doped carbon nanostructures, *Carbon*. **2018**, 126, 305-12.

[16] Tian Z., Huang J., Zhang X., Shao G., He Q., Cao S., Yuan S., Ultra-microporous N-doped carbon from polycondensed framework precursor for CO2 adsorption, *Microporous and Mesoporous Materials*. **2018**, 257, 19-26.

[17] Shokuhi Rad A., Esfahanian M., Maleki S., Gharati G., Application of carbon nanostructures toward SO2 and SO3 adsorption: a comparison between pristine graphene and N-doped graphene by DFT calculations, *Journal of Sulfur Chemistry*. **2016**, 37, 176-88.

[18] Frisch M., Trucks G., Schlegel H., Scuseria G., Robb M., Cheeseman J., et al., *Gaussian 09 D.01 Program*. Gaussian. Inc.: Wallingford, CT, USA,**2009**.

[19] Frisch A., Dennington R., Keith T., Millam J., Nielsen A., Holder A., Hiscocks J., *Gaussview version 5 user manual*. Gaussian Inc., Wallingford, CT, USA,**2009**.

[20] Morais SN., Lobo CE., Padilha CE., Souza DF., Souza JR., Oliveira JA., Ruiz JA., Removal of carbon dioxide from a multicomponent gas mixture by absorption using a Y-type microreactor, *Industrial & Engineering Chemistry Research*. **2021**, 60, 11590-9.

[21] Wang Y., Han X., Liu Y., Removal of carbon monoxide from simulated flue gas using two new Fenton systems: mechanism and kinetics, *Environmental Science &Technology*. **2019**, 53, 10387-97.

[22] Tiwari SK., Sahoo S., Wang N., Huczko A., Graphene research and their outputs: status and prospect, *Journal of Science: Advanced Materials and Devices*. **2020**, 5, 10-29.

[23] Yu W., Sisi L., Haiyan Y., Jie L., Progress in the functional modification of graphene/graphene oxide: A review, *RSC Advances*. **2020**, 10, 15328-45.
[24] Niu F., Shao ZW., Gao H., Tao LM., Ding Y., Si-doped graphene nanosheets for NOx gas sensing, *Sensors and Actuators B: Chemical*. **2021,** 328, 129005.
[25] Mirzaei M., Mirzaei M., SiC nanotubes: DFT calculations of 29Si and 13C NMR properties, *Monatshefte für Chemie-Chemical Monthly*. **2010,** 141, 941-3.