

THIẾT KẾ VẬT LIỆU ZEOLIT – KHUNG HỮU CƠ CỘNG HÓA TRỊ ỨNG DỤNG LƯU KHÍ H₂, CH₄

Đỗ Hữu Hà¹, Phạm Trần Nguyên Nguyên²

¹Viện Khoa học và Công nghệ Tính toán, Hồ Chí Minh

²Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM

hadohuu1311@gmail.com, ptnnguyen@hcmus.edu.vn

Tóm tắt

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đề xuất chiến lược thiết kế vật liệu khung hữu cơ cộng hóa trị (COF) dựa trên khung cấu trúc của zeolit (Ze-COF). 100 cấu trúc Ze-COF được thiết kế bằng cách thay thế các nguyên tử silic bởi cacbon thông qua cầu nối pyrrole. Nhìn chung, diện tích bề mặt, thể tích xốp và kích thước lỗ xốp của các vật liệu COF nằm trong khoảng từ 300 – 3500 m²/g, 0,01 – 1,21 cm³/g và 5 – 24 Å⁰. Dựa trên các tiêu chí hướng đến ứng dụng lưu trữ khí metan và hydro chúng tôi đã sàng lọc được 3 cấu trúc được mong đợi là có khả năng hấp phụ metan cao. Đường hấp phụ đẳng nhiệt của các cấu trúc sau khi sàng lọc được mô phỏng bằng phương pháp Grand canonical Monte Carlo với áp suất từ 1 – 85 bar. Kết quả cho thấy, 2 vật liệu có dung lượng hấp phụ tại 77 K là JSRN (53,45 g/L) và OBWN (53,94 g/L) được xem là vật liệu hứa hẹn cho lưu trữ khí hydro. Bên cạnh đó hai vật liệu này cũng cho kết quả thú vị trong hấp phụ khí metan tại 35 bar, 298 K, JSRN (173,52 cm³/cm³) và OBWN (195,54 cm³/cm³).

Từ khóa: Khung hữu cơ cộng hóa trị, lưu trữ metan, zeolit