



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

مدل سازی مولکولی حمل و نقل CO_2 در مونت موریلونیت؛ پخش و نفوذ

عنوان انگلیسی مقاله :

Molecular modeling on transportation of CO_2 in montmorillonite:
Diffusion and permeation



توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.



بخشی از ترجمه مقاله

4.conclusion

CO₂ diffusion and permeation in Mt under varying conditions is investigated by MD. The results show that while both water content and temperature are positively correlated to the SDC, the SDCs of CO₂ and H₂O display a peak with the increase of CO₂ concentration. To explain the unusual findings of the SDC further, FFV within Mt and the displacement distribution of CO₂ is analyzed. It is found that FFV has an important effect on the diffusion of gas molecules in Mt. The increase of CO₂ concentration causes the Mt to expand, increasing the internal FFV of Mt and providing gas molecules with more space for diffusion.

4. نتیجه گیری

پخش و نفوذ CO₂ در مونت موریلونیت تحت شرایط متخلف با روش دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج بررسی حاکی از آن است که با این که حجم و دمای آب هر دو رابطه مثبتی با ضریب خودپخشی سیالات دارند، ضرایب خودپخشی CO₂ و H₂O یک نقطه اوج را به همراه افزایش غلظت CO₂ به نمایش می گذارند. برای تشریح هر چه بیشتر یافته های غیرمعمول ضریب خودپخشی، FFV مونت موریلونیت و توزیع جابه جایی CO₂ مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت. نتایج این تحلیل نشان داد که FFV تأثیر مهمی بر پخش مولکول های گاز در مونت موریلونیت دارد. افزایش غلظت CO₂ باعث می شود مونت موریلونیت انبساط یابد، FFV داخلی مونت موریلونیت افزایش پیدا کند و فضای بیشتری برای پخش در اختیار مولکول های گاز قرار گیرد.



توجه!

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت

ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، [اینجا](#) کلیک نمایید.