



## بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

شبیه سازی دینامیک مولکولی تصفیه آب با استفاده از

نانو ورق های زئولیت نوع MFI

عنوان انگلیسی مقاله :

Molecular dynamics simulation of water purification

using zeolite MFI nanosheets



### 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. Conclusions

By means of non-equilibrium MD simulations, it was shown that how zeolite MFI membrane can be highly efficient for water purification. The two hazardous chemicals, the copper chloride and mercury chloride, were added to water in the simulation box. Various pressures were applied to the system for investigating the separation process in a reverse osmosis system, from 10 MPa to 200 MPa. In all applied pressures to the system, the zeolite membrane rejected 100% of the copper and mercury ions from water with a high chlorine ions rejection of 97.6% at 100 MPa and 93.6% at 200 MPa and 100% at other lower applied pressures. Simultaneous high-water flux and ion rejection, as an important factor in membrane technology, was seen in the implemented zeolite. These behaviors of the zeolite MFI make it a competitive candidate for fast and efficient water purification. Furthermore, with improvement of industrial fabrication technology, it could be produced to be stable and large enough for realistic applications as an earth-abundant and cost-effective material.

### ۴. نتیجه گیری

با کمک شبیه سازی های دینامیک مولکولی غیرتعادلی، نشان داده شد که چگونه غشای زئولیت نوع MFI می تواند بازدهی بالایی برای خالص سازی آب داشته باشد. دو ماده شیمیایی خطرناک (کلراید مس و کلراید جیوه) به آب درون جعبه شبیه سازی، افزوده شدند. برای بررسی روند تفکیک در سیستم اسمز معکوس، فشارهای مختلفی از ۱۰ مگاپاسکال تا ۲۰۰ مگاپاسکال به سیستم اعمال گردید. در تمام فشارهای اعمال شده به این سیستم، غشای زئولیت ۱۰۰ درصد یون های مس و جیوه را از آب زدود؛ فرازنی بیش از ۹۷/۶ درصد یون های کلر در فشار ۱۰۰ مگاپاسکال، فرازنی ۹۳/۶ درصد این یونها در فشار ۲۰۰ مگاپاسکال، و فرازنی ۱۰۰ درصد یون های کلر در فشارهای پایین تر، توسط این غشا مقدور بود. وجود توأمان دو ویژگی: شار بالای آب و فرازنی یون، به عنوان دو عامل مهم در صنعت تولید غشاهای تصفیه، در زئولیت بکاررفته در این پژوهش مشاهده گردید. این رفتارهای زئولیت MFI، آن را به کاندیدی مناسب در عرصه رقابت برای تصفیه سریع و کارآمد آب، تبدیل می کند. علاوه بر این، با پیشرفت فناوری ساخت محصولات صنعتی، این غشا می تواند برای کاربرد در دنیای واقعی، بطور مداوم، و به مقدار زیاد (برای تمام دنیا) تولید شود و ساخت آن، مقرون به صرفه باشد.



### 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.