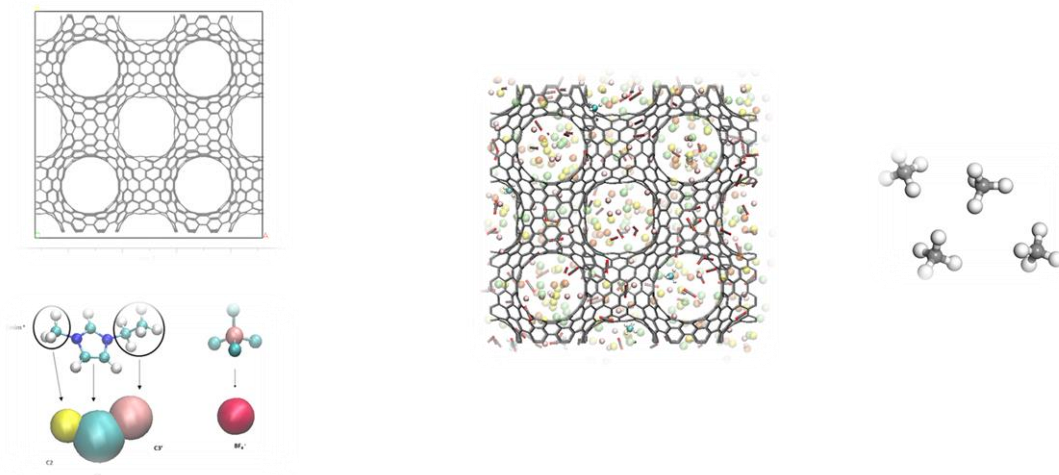


## The impact of ionic liquid loading in three-dimensional carbon nanotube networks on the separation of CO<sub>2</sub> /CH<sub>4</sub> fluid mixtures: Insights from molecular simulations.

Ο μεταδιδάκτωρ συνεργάτης **Δρ. Ιωάννης Σκαρμούτσος** και ο Εντεταλμένος Ερευνητής του **ΙΘΦΧ/ΕΙΕ Δρ. Εμμανουήλ Κλώντζας** είναι συν-συγγραφείς της δημοσίευσης “ *The impact of ionic liquid loading in three-dimensional carbon nanotube networks on the separation of CO<sub>2</sub> /CH<sub>4</sub> fluid mixtures: Insights from molecular simulations*”, **I. Skarmoutsos**, E. N. Koukaras, **E. Klontzas** στο έγκριτο περιοδικό φυσικοχημείας **Journal of Physical Chemistry C** 2021, 125, 24, 13508-13522.

Η δημοσίευση αποτελεί συνεργασία του ΙΘΦΧ με το εργαστήριο κβαντικής και υπολογιστικής χημείας του τμήματος Χημείας του ΑΠΘ. Στην παρούσα θεωρητική και υπολογιστική μελέτη εξετάστηκε η επίδραση της συγκέντρωσης ενός ιοντικού υγρού εγκλωβισμένου μέσα σε πρότυπα νανοπορώδη υλικά με βάση τον άνθρακα στον αποτελεσματικό διαχωρισμό μείγματος αερίων αποτελούμενο από CO<sub>2</sub> και CH<sub>4</sub>. Η επιλογή τόσο της πορώδους ανθρακικής δομής όσο και του ιοντικού υγρού βασίστηκαν σε προγενέστερη γνώση σχετικά με την εξαιρετική τους ικανότητα να διαχωρίζουν το συγκεκριμένο μείγμα αερίων αποτελεσματικά σε σχέση με άλλα υλικά στην κατηγορία του καθενός. Η παρούσα έρευνα έδειξε ότι το συγκεκριμένο υβριδικό



υλικό μπορεί να ανταγωνιστεί μια ποικιλία άλλων μοντέρνων πορώδων υλικών στην αποτελεσματικότητα διαχωρισμού του συγκεκριμένου μείγματος αερίων, ειδικά σε κανονικές συνθήκες πίεσης και θερμοκρασίας, ενώ η ικανότητα διαχωρισμού αυξάνεται με την αύξηση της συγκέντρωσης του ιοντικού υγρού. Η υπολογιστική μεθοδολογία που αναπτύχθηκε καθώς και τα συμπεράσματα που εξήχθησαν ήδη αξιοποιούνται για την μελέτη νέων επιλεγμένων πορώδων υλικών εμποτισμένων με μικρές ποσότητες ιοντικών υγρών για τον διαχωρισμό και άλλων μειγμάτων αερίων βιομηχανικού ενδιαφέροντος.

Περισσότερες πληροφορίες στον σύνδεσμο: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c00346>