



Research Paper

## Molecular Dynamics Simulating the Performance of Carbon Nanotubes in Water Desalination

Omid Ghader<sup>1</sup> and Mahdi Sahebi<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>M.Sc., Department of Mechanical Engineering, Faculty of Mechanical Engineering, Qom University of Technology, Qom, Iran

<sup>2</sup>Assist. Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Mechanical Engineering, Qom University of Technology, Qom, Iran

### Article information

**Received:** September 22, 2021

**Revised:** March 03, 2022

**Accepted:** March 05, 2022

### Keywords:

Carbon Nanotubes  
Desalination  
Molecular Simulation  
Porosity  
Water Purification

\*Corresponding author:  
[sahebi@qut.ac.ir](mailto:sahebi@qut.ac.ir)



### Abstract

Recently, the use of carbon nanotubes in water treatment membranes has been proposed. Understanding the mechanism of the process in nanotubes may have a significant impact on the development of this technology. In this study, to clarify the molecular mechanism and measure the impact of the effective factors, the water desalination process by filters consisting of carbon nanotubes has been investigated by the molecular dynamics simulation method. The effect of factors such as nanotube diameter applied pressure, and porosity on the process is studied. The results showed that reducing the filtration pressure increases salt rejection. However, reducing the pressure reduces the water flow through the nanotubes, which should be considered in the optimal design of the treatment system. Increasing the porosity of the membrane for a given nanotube does not have a significant effect on the desalination rate, but it greatly increases the flow rate. The simulation results showed that if the geometry studied in this study is used as a filter for nanotubes (10, 10), the flow rate of water at a pressure of 100 MPa will be equal to 7 ml/s per unit cross-section of the filter.

© Authors, Published by **Environment and Water Engineering** journal. This is an open-access article distributed under the CC BY (license <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).



### Introduction

Today, freshwater scarcity has become one of the most important global challenges. Since most of the water on earth is saline, desalination of a small percentage of this water can also have a significant impact on the drinking water supply. Due to the continuous improvement of desalination methods in recent years, these methods can be safely used to remove salt from seawater and other sources. One of the types of

desalination methods is the membrane filtration method, such as the use of microfilters, nanofilters, and reverse osmosis. In recent years, carbon nanotubes have received increasing attention due to their extraordinary properties such as very low friction in water passage, strength and high heat transfer. Research has shown that the use of carbon nanotubes in improving water treatment and desalination performance can be very significant in terms of



reducing energy consumption and environmental issues. Recent research has suggested the use of carbon nanotubes to improve the reverse osmosis purification process. However, the physical mechanisms of carbon nanotube purification are still unclear. In the present study, in order to create a better understanding of the water purification mechanism of the salt-containing solution and also to measure the effect of physical variables affecting the purification quality, the passage of water-salt solution through carbon nanotubes has been simulated using molecular dynamics method. In this study, the flow properties, as well as the amount of desalination of nanotubes at different pressures, different membrane porosities, and different nanotube diameters, have been studied.

### Material and Methods

The molecular dynamics method has been used for modeling. The choice of this simulation method is due to the fact that to study the flow of water through the nanotube, the equations governing continuous environments are not of acceptable accuracy, so a method based on following the individual path of particles and molecules of the system has been used. In this method, a set of atomic positions, molecular velocities and intermolecular forces determine the position of the whole system at any given moment by applying Newtonian equations of motion and temporal integration of Newtonian equations. In this method, using the relationships presented in statistical mechanics, the physical properties of the system such as pressure, temperature, density, etc. are extracted. The Lammmps software package is used to create the initial atomic configuration as well as the simulation calculations. In the geometry, there is a water tank on the left and another tank on the right. Between the water tanks are graphene sheets and carbon nanotubes attached to them. In the left tank, there are water molecules and sodium and chlorine molecules and in the right tank, there are only water molecules. Graphene plates are square and the length of each side is 54 angstroms  $L_x = L_y = 54 \text{ \AA}$ . The length of the nanotubes is assumed to be  $19 \text{ \AA}$ . The simulation was performed with nanotubes (6,6), (8,8), and (10,10), and the nanotube numbers equal to 1, 2, and 4, which indicate the amount of different porosity of the membrane. The pressure studied in the simulations is equal to 100, 200, and 400 MPa.

### Results

First, the effect of pressure on desalination is discussed. Table (1) shows the amount of nanotube ion rejection (10, 10) at pressures of 400, 200, and 100 MPa.

Table 1 carbon nanotube ion-rejection (10, 10) at various pressures

Pressure	Sodium ion rejection rate (percentage)	Chlorine ion deionization rate (percentage)
400 MPa	68.5	60
200 MPa	85.7	77
100 MPa	97	97

It is observed that ion rejection increases with decreasing applied pressure, so that at pressures less than 100 MPa, the ion rejection reaches 100%.

Table (2) shows the effect of changes in pressure and type of nanotube on the flow rate through different nanotubes. According to this table, it can be seen that with increasing pressure, the water flow through the nanotube increases. The table also shows that the flow rate increases with the increasing diameter of the nanotube. Increasing the diameter of the nanotube reduces the frictional resistance of the nanotube to the flow, increases the volume of the nanotube, and increases the number of water molecules in the nanotube.

Table 2 Flow rate depending on the type of nanotube at different pressures

Pressure (MPa)	Flow rate (1/ns.nm <sup>2</sup> )		
	Nanotube 6,6	Nanotube 8,8	Nanotube 10,10
400	2186	4966	9421
200	1262	3146	4245
100	841	1547	1929

Porosity is a measure of the amount of empty space relative to the total space of matter. The change in porosity is simulated by changing the number of nanotubes in a certain area of the graphene surface (as the membrane surface). The greater the number of nanotubes, the greater the amount of space created on the graphene plate. Fig. 1 shows the effect of porosity change on nanotube ion rejection.

As can be seen, in none of the nanotubes did the increase in porosity has a significant effect on

ion rejection and the reason is that the size of the nanotubes plays a major role in removing the ions. This is true for flow rate. Simulations show that increasing porosity has a great effect on the flow of water. Therefore, it can be concluded that, filters with higher porosity should be used.

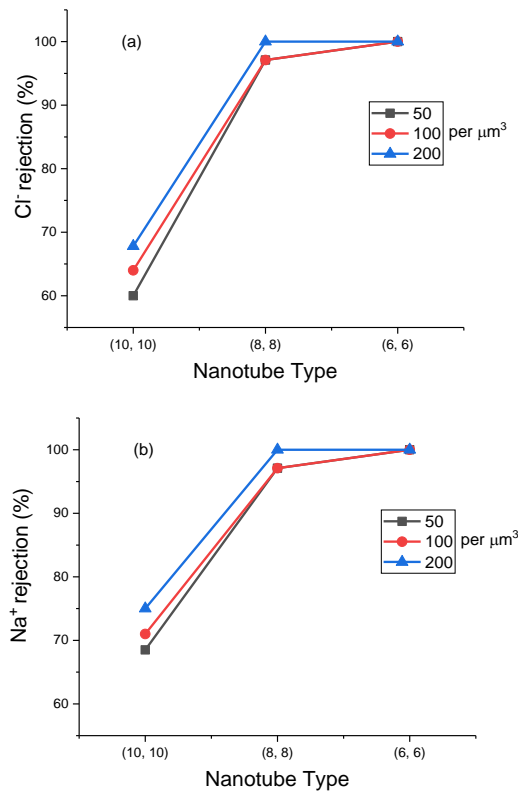


Fig. 1 Effect of porosity on ion-rejection for different nanotubes: a) sodium ion and b) chloride ion

**Conclusions**

In this paper, the process of water purification from saline water with the aid of filters consisting of carbon nanotubes has been

investigated through the molecular dynamics’ simulation method. The aim of the simulation is to clarify the molecular mechanism and investigate the effect of factors affecting the process. The factors such as nanotube diameter applied pressure, and porosity on the process have been studied. The results of the simulations showed that the passage of water molecules through the nanotube occurs as a regular molecular chain. It was also found that reducing the filtration pressure increases the salt rejection so that at pressures below 100 MPa the salt rejection rate for all nanotubes studied in this paper was 100%. Of course, reducing the pressure reduces the amount of water passing through the nanotubes, which should be considered in the optimal design of the treatment system. Increasing the porosity of the membrane for a given nanotube does not have a significant effect on the desalination rate, but it greatly increases the flow rate. The simulation results showed that if the geometry studied in this study is used as a filter for nanotubes (10, 10), the flow rate of water at 100 MPa pressure will be 7 mL / s per unit cross section of the filter.

**Data Availability**

The data used in this research are presented in the paper.

**Conflicts of interest**

The authors of this paper declared no conflict of interest regarding the authorship or publication of this article.



ISSN: 2476-3683

محیط زیست و مهندسی آب

Homepage: [www.jewe.ir](http://www.jewe.ir)

مقاله پژوهشی

## شبیه سازی عملکرد نانولوله های کربنی در نمک زدایی از آب به روش دینامیک مولکولی

امید قادر<sup>۱</sup> و مهدی صاحبی<sup>۲\*</sup>

<sup>۱</sup> کارشناس ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی قم، قم، ایران  
<sup>۲</sup> استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی قم، قم، ایران

## اطلاعات مقاله

## چکیده

تاریخ دریافت: [۱۴۰۰/۰۶/۳۱]

تاریخ بازنگری: [۱۴۰۰/۱۲/۱۲]

تاریخ پذیرش: [۱۴۰۰/۱۲/۱۴]

## واژه های کلیدی:

تصفیه آب

تخلخل

دفع نمک

دینامیک مولکولی

نانولوله کربنی

\*نویسنده مسئول:

[sahebi@qut.ac.ir](mailto:sahebi@qut.ac.ir)

اخیراً، استفاده از نانولوله های کربنی برای بهبود فرایند تصفیه آب به روش اسمز معکوس پیشنهاد شده است. روشن شدن سازوکار فرایند تصفیه در این نانولوله ها تأثیر شایانی در توسعه این فناوری دارد. در این پژوهش به منظور روشن تر شدن سازوکار این فرایند در مقیاس مولکولی و سنجش عوامل تأثیرگذار، موضوع تصفیه آب از محلول آب و نمک به وسیله فیلترهای متشکل از نانولوله های کربنی، به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است. به این منظور عواملی همچون قطر نانولوله، فشار اعمالی و میزان تخلخل، مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج شبیه سازی ها نشان دهنده عبور آب از نانولوله به صورت یک زنجیره منظم مولکولی است. حاصل این پدیده کاهش شدید اصطکاک در نانولوله است. نتایج مشخص کرد که کاهش فشار تصفیه موجب افزایش دفع نمک و البته کاهش آب عبوری از نانولوله ها می شود که در طراحی بهینه سیستم باید مورد توجه قرار گیرد. افزایش میزان تخلخل غشاء برای یک نانولوله مشخص تأثیری در نمک زدایی ندارد، در حالی که به شدت دبی آب عبوری را افزایش می دهد. نتایج شبیه سازی ها نشان داد که در صورت استفاده از نانولوله (۱۰،۱۰)، دبی آب عبوری در فشار ۱۰۰ MPa برابر با ۷ ml/s به ازای سطح مقطع واحد از فیلتر خواهد بود. نتایج این پژوهش حاکی از پتانسیل بالای نانولوله های کربنی برای استفاده در تصفیه آب است.

## ۱- مقدمه

با وجود اینکه بیشتر سطح زمین از آب پوشیده شده است، تنها کم تر از ۳٪ آن، آب شیرین است ( Abdelkareem et al. 2021). پیش بینی می شود که این شرایط نامطلوب تشدید شود زیرا از طرفی با شدت بخشی به فرایند صنعتی شدن، آلودگی آب ها رو به افزایش است و از طرفی دیگر افزایش جمعیت جهانی، تغییر شرایط آب و هوایی زمین و افزایش استانداردهای بهداشتی نیاز به آب شرب را افزایش می دهد. (Ali et al. 2018). از این رو مسئله فراهم آوردن آب

با وجود اینکه بیشتر سطح زمین از آب پوشیده شده است، تنها کم تر از ۳٪ آن، آب شیرین است ( Abdelkareem et al. 2015; Sobhanardakani et al. 2018). امروزه کمبود آب شیرین به یکی از مهم ترین چالش های جهانی تبدیل شده است، به طوری که حداقل چهار میلیارد نفر به مدت یک ماه در طول سال شرایط تنش آبی را تجربه می کنند ( Lim et



سنگین دارند. (Gupta et al. (2019) با استفاده از روش یونیزاسیون خازنی، گرافنی با تخلخل بالا و تعداد بالای نانولوله تولید کردند که ظرفیت نمک‌زدایی بالایی دارد. همچنین (Hong et al. (2019) با ایجاد حلقه‌های شیمیایی در ورودی نانولوله و ایجاد گشتاور دوقطبی بالا در مولکول‌های آب، توانستند مقدار جریان عبوری آب از نانولوله را افزایش دهند. تحقیقات نشان می‌دهد، تغییر دهانه ورودی و خروجی نانولوله‌های کربنی به شکل ساعت شنی، مانند آکوپورین‌های طبیعی، می‌تواند باعث بهبود عملکرد این نانولوله‌ها در گذردهی آب شود (Hadadi and kamali (2020). Zhang et al. (2020) با استفاده از شبیه‌سازی غیر تعادلی دینامیک مولکولی محدوده وسیعی از فشار کاری را مورد بررسی قرار دادند و نشان دادند که نمک‌زدایی برای مجراهای با ابعاد نانو به شدت به فشار وابستگی دارد. (AbdAllah et al. (2020) تأثیر درصد وزنی و نوع نانولوله-های کربنی اضافه‌شده به فیلترهای ساده جاذب نمک بر نمک‌زدایی آب (دریای سرخ) و پساب را مورد مطالعه قرار دادند. نتایج مطالعه نشان داد که چنین فیلترهایی می‌توانند به‌عنوان پیش‌تصفیه در سیستم‌های اسمز معکوس به کار آیند و از هزینه‌های مربوط به ایجاد فشار و انرژی بکاهند. پژوهش‌های اخیر استفاده از نانولوله‌های کربنی برای بهبود فرایند تصفیه اسمز معکوس را پیشنهاد داده‌اند (Fang et al. (2020). با این‌وجود هنوز سازوکارهای فیزیکی تصفیه به کمک نانولوله‌های کربنی به‌خوبی روشن نیستند (Ang et al. (2020). همچنین برای استفاده از نانولوله‌ها در فرایند تصفیه و طراحی غشا مبتنی بر نانولوله کربنی می‌بایست تأثیر عوامل مؤثر در مسئله مشخص شوند. بدین منظور در پژوهش حاضر برای ایجاد درک بهتر از سازوکار تصفیه آب از محلول حاوی نمک و همچنین سنجش میزان تأثیر متغیرهای فیزیکی مؤثر بر کیفیت تصفیه، به شبیه‌سازی عبور محلول آب و نمک از نانولوله‌های کربنی با استفاده از روش دینامیک مولکولی پرداخته شده است. از آنجاکه بررسی‌هایی که در پژوهش‌های محققان پیشین انجام شده است هر یک محدود به هندسه و شرایط کاری مشخصی بوده است، نیاز به بررسی‌های بیشتر به‌منظور رسیدن به یک دید کلی ضروری به نظر می‌رسد. در این پژوهش خواص جریان و همچنین مقدار نمک‌زدایی نانولوله‌ها در فشارهای مختلف، تخلخل‌های مختلف غشا و قطرهای متفاوت نانولوله مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج این پژوهش می‌تواند در

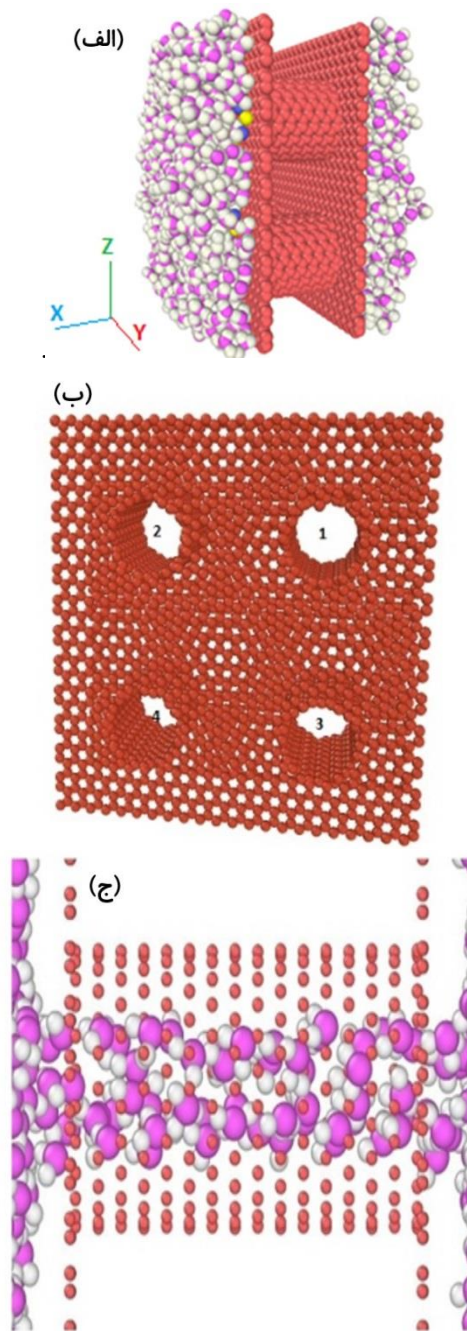
آشامیدنی سالم به‌خصوص از طریق راه‌های جدید و کم‌هزینه در سال‌های اخیر اهمیت بیشتری یافته است. از آنجاکه بیش از ۹۷٪ آب موجود بر روی زمین را آب‌های شور تشکیل می‌دهند، شیرین‌سازی درصد کمی از این آب نیز می‌تواند تأثیر مهمی بر تأمین آب شرب بگذارد (Ahmad and Azam (2019).

روش‌های نمک‌زدایی معمولاً به‌عنوان روش‌هایی هزینه‌بر و با مصرف انرژی بالا به‌حساب می‌آیند. البته به‌واسطه پیشرفت و بهبود مداوم روش‌های نمک‌زدایی در چند سال اخیر، از این روش‌ها به‌صورت مطمئن برای زدودن نمک از آب دریا و دیگر منابع می‌توان استفاده کرد (Ahmad and Azam (2019). یکی از انواع روش‌های نمک‌زدایی، روش مبتنی بر فیلتراسیون غشایی، مانند استفاده از میکروفیلترها، نانوفیلترها و روش اسمز معکوس است که با ایجاد یک مانع فیزیکی در مسیر عبور آلاینده‌ها بر اساس اندازه باعث حذف آن‌ها می‌شود (Adibfar and Shirkhodaee (2010). عملکرد سیستم‌های غشایی بیش از همه تحت تأثیر ماده‌ی مورد استفاده در غشا است. بنا بر تحقیقات اخیر، جاسازی نانو مواد در داخل غشاء می‌تواند مزیت‌های بزرگی برای بهبود عملکرد غشاء در گذردهی آب، دفع نمک و حتی افزایش استحکام مکانیکی و حرارتی غشاءها به وجود آورد (Qu et al. (2013). در سال‌های اخیر نانولوله‌های کربنی به دلیل خواص فوق‌العاده‌ای نظیر اصطکاک بسیار کم در عبور آب، استحکام و انتقال حرارت بالا مورد توجه روزافزون واقع شده‌اند. تحقیقات نشان داده‌اند استفاده از نانولوله‌های کربنی در بهبود عملکرد تصفیه و نمک‌زدایی آب می‌تواند از نظر کاهش مصرف انرژی و مسائل محیط‌زیستی بسیار قابل‌ملاحظه باشد (Roy et al. (2020).

(Yang et al. (2018) نشان دادند که آب می‌تواند با سرعت بالایی از میان نانو غشاهای کربنی عبور کند. Sam et al. (2019) با استفاده از شبیه‌سازی به روش دینامیک مولکولی اثر کایرالیته نانولوله‌های کربنی را بر جریان آب عبوری از نانولوله‌های کربنی مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها دریافتند که بیشترین جریان و طول لغزش مربوط به نانولوله‌های آرمچیر (دسته‌سندلی) و کم‌ترین آن مربوط به نانولوله‌های زیگزاگ است. (Panahi et al. (2019) با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان دادند که نانولوله‌های کربنی فلورینه عملکرد بهتری از نانولوله‌های کربنی خالص در حذف فلزات







شکل ۱- نمایی از مدل شبیه‌سازی. الف) نمای سه‌بعدی از کل دامنه ب) صفحه گرافن شامل چهار نانولوله ج) نمایی از حرکت آب در نانولوله

Fig. 1 Schematic of the simulation model. a) 3D view of the domain b) the graphene with four nanotubes c) water flow in nanotube

در شکل (۱) کره‌های به رنگ قرمز نشان‌دهنده اتم‌های کربن است. کره‌های صورتی‌رنگ اتم‌های اکسیژن و ذرات سفیدرنگ اتم‌های هیدروژن را نشان می‌دهند. کره‌های به رنگ آبی اتم سدیم و رنگ زرد نشان‌دهنده اتم کلر هستند. مولکول‌های آب در دو طرف غشاء وجود دارند و مولکول‌های

انتخاب و طراحی بهینه نانولوله‌های کربنی برای استفاده در فیلترهای تصفیه آب به کار آید.

## ۲- مواد و روش‌ها

برای مدل‌سازی از روش دینامیک مولکولی استفاده شده است. انتخاب این روش شبیه‌سازی از این‌رو است که برای مطالعه جریان آب عبوری از نانولوله، معادلات حاکم بر محیط‌های پیوسته دقت قابل قبولی ندارند در نتیجه از روشی که مبتنی بر دنبال کردن مسیر تک‌تک ذرات و مولکول‌های سیستم است استفاده شده است. این روش برای توصیف رفتار جریان در ابعاد نانو که جریان در این ابعاد به صورت پیوسته نیست، روش مناسبی است. در این روش مجموعه‌ای از موقعیت‌های اتمی، سرعت مولکولی و نیروهای بین‌مولکولی با اعمال معادلات حرکت نیوتن و انتگرال‌گیری زمانی از معادلات نیوتن موقعیت کل سیستم را در هر لحظه مشخص می‌کنند. در این روش با استفاده از روابط ارائه شده در مکانیک آماری خواص فیزیکی سیستم نظیر فشار، دما، چگالی و غیره استخراج می‌شود (Hollingsworth Dror 2018). برای ایجاد پیکربندی اتمی اولیه و نیز محاسبات مربوط به شبیه‌سازی از بسته نرم‌افزاری لمپس<sup>۱</sup> استفاده شده است. لمپس یک کد دینامیک مولکولی کلاسیک متن‌باز است که قابلیت اجرا به صورت پردازش موازی را نیز دارد (Plimpton 1995). برای استخراج میدان نیروهای بین‌مولکولی از اطلاعات ارائه شده به وسیله Mayo et al. (1990) استفاده شده است. شبیه‌سازی در چند مرحله انجام شد. در مرحله اول پیکربندی اولیه سیستم و مدل برهمکنش ذرات بر یکدیگر انتخاب شد. بعد از آن، در مرحله به تعادل رسانی سیستم، خواص ترمودینامیکی کنترل شد. سپس مرحله اعمال نیرو و محاسبه مکان جدید ذرات انجام شد. در این مرحله می‌توان خواص را به کمک روابط آماری استخراج کرد (Hollingsworth and Dror 2018).

در هندسه مسئله، یک مخزن آب در سمت چپ و مخزنی دیگر در سمت راست قرار دارد. در بین مخازن آب، صفحات گرافنی و نانولوله‌های کربنی متصل به آن‌ها قرار گرفته‌اند. در مخزن سمت چپ مولکول‌های آب و مولکول‌های سدیم و کلر قرار دارند و در مخزن سمت راست، تنها مولکول‌های آب هستند (شکل ۱).

<sup>۱</sup>Lammps

گرفته شده است. به دلیل وجود بار الکتریکی جزئی روی اتم-های هیدروژن و اکسیژن، برای برهمکنش بین مولکول‌های آب از ترکیب پتانسیل لنارد-جونز و کولومب، استفاده شده است (Mayo et al. 1990). پتانسیل مورد استفاده برای اتم‌های سدیم و کلر از نوع ترکیب پتانسیل باکینگهام و کولومب است (Mayo et al. 1990). پتانسیل کلی بین مولکول‌های آب، نمک و اتم‌های کربن نیز از نوع ترکیب Lennard-Jones و Coulomb است (Liu et al. 2018). شکل کلی پتانسیل لنارد-جونز-کولومب در رابطه (۱) نشان داده شده است.

$$\phi(r_{ij}) = \left\{ 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \right\} + \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad r_{ij} \leq r_c \quad (1)$$

به نوعی نشان‌دهنده بزرگی برهم‌کنش است.  $\sigma$  قطر ذره است. شعاع قطع است. شکل کلی پتانسیل باکینگهام-کولومب در رابطه (۲) نشان داده شده است (Rice and Hirschfelder 1954).

$$\phi(r_{ij}) = \frac{\epsilon}{1-6/\alpha} \left[ \frac{6}{\alpha} \exp\left(\alpha\left(1 - \frac{r_{ij}}{r_m}\right)\right) - \left(\frac{r_m}{r_{ij}}\right)^6 \right] \quad (2)$$

نمک در ابتدای شبیه‌سازی فقط در سمت چپ بارنگ‌های آبی و زرد وجود دارند. صفحات گرافن، مربعی هستند و اندازه طول هر ضلع آن برابر با  $L_x = L_y = 54 \text{ \AA}$  است شکل (۱) (ب). طول نانولوله‌ها،  $19 \text{ \AA}$  در نظر گرفته شده است. این شبیه‌سازی با نانولوله‌های (۶,۶) و (۸,۸) و (۱۰,۱۰) و تعداد ۱، ۲ و ۴ نانولوله که نشانگر میزان تخلخل‌های متفاوت غشا است، انجام شده است. میزان فشار مورد مطالعه در شبیه‌سازی‌ها برابر با ۱۰۰، ۲۰۰ و ۴۰۰ MPa است. طول پیوند بین اتم‌های کربن  $1.54 \text{ \AA}$  است. بار جزئی در نظر گرفته شده برای اتم کربن صفر است (Tao et al. 2018). بار جزئی سایر اتم‌ها مطابق (Mendoca et al. 2019) در نظر

که، بار الکتریکی منتسب شده به ذره  $q_j$  بار الکتریکی منتسب شده به ذره  $q_i$  است.  $r_{ij} = |r_i - r_j|$  فاصله میان مراکز دو ذره  $r_i$  و  $r_j$  است. پارامتر  $\epsilon$  قدرت تقابل میان ذرات را نشان می‌دهد و هم بعد با انرژی است و

که،  $r_m = (2)^{1/6} \sigma$  است و  $\alpha$  یک ضریب بدون بعد آزاد است که مقدار آن برای عناصر مختلف تفاوت دارد. مقادیر  $\epsilon$  و  $\sigma$  در جدول (۱) برای اتم‌های مختلف آمده است.

جدول ۱- مقادیر  $\epsilon$  (eV)،  $\sigma$  (Å) و  $\alpha$  (Å) در شبیه‌سازی (Rice and Hirschfelder 1954)

Table 1 The  $\epsilon$  (eV),  $\sigma$  (Å) and  $\alpha$  (Å) values used in the simulation (Rice and Hirschfelder 1954)

Atom	$\epsilon$ (eV)				$\sigma$ (Å)				$\alpha$ (Å)
	Oxygen	Hydrogen	Sodium	Chlorine	Oxygen	Hydrogen	Sodium	Chlorine	
Oxygen	0.00659568	0.0036252	0.0093	0.00705	3.1507	1.7753	3.274	3.677	2.85
Hydrogen	0.0036252	0.00199475	0.003741	0.002795	1.7753	0.4	3.168	3.572	1.78
Sodium	0.0093	0.003741	0.003473	0.2903	3.274	3.168	2.245	3.84	2.73
Chlorine	0.00705	0.002795	0.2903	0.0002458	3.677	3.572	3.84	6.522	4.1

اتم‌های اکسیژن در مخزن سمت چپ وارد می‌شود و با تغییر تعداد اتم‌های اکسیژن مقدار این نیرو ثابت می‌ماند. رابطه بین اختلاف فشار اعمالی و نیروی وارد بر هر اتم اکسیژن به صورت رابطه (۳) است (Rizzuto et al. 2018).

$$\Delta P = \frac{n \times F}{A} \quad (3)$$

که،  $n$  تعداد مولکول‌های اکسیژن،  $F$  نیروی وارد بر هر مولکول اکسیژن و  $A$  سطح مقطع غشاء گرافنی است. کل

توصیه شده است که شعاع قطع بزرگ‌تر از  $2/5$  برابر ماکزیمم قطر مولکولی باشد  $r_c = 2.5\sigma$  (Hollingsworth and Dror 2018). شعاع قطع در محاسبات نیروی بین‌مولکولی  $10 \text{ \AA}$  در نظر گرفته شده است. در شبیه‌سازی‌ها، اتم‌های کربن و در نتیجه نانو کانال متشکله از آن‌ها مانند یک جسم صلب ثابت در نظر گرفته شده‌اند. برای به حرکت درآوردن آب و ایجاد فشار پمپاژ از روش اعمال نیروی خارجی مستقیم به مولکول‌های آب استفاده شده است. این نیرو فقط به



دوره‌ی شبیه‌سازی در این مسئله به سه مرحله تقسیم شده است. در مرحله اول مدت‌زمانی برابر با ۰/۲۲۵ ns بدون اعمال نیرو برای به تعادل رسیدن مولکول‌ها، در نظر گرفته شده است. سپس نیروی رانش اعمال شده و شبیه‌سازی به مدت ۱/۱۵ ns به منظور ثابت شدن خواص مسئله بعد از اعمال نیرو ادامه می‌یابد. در مرحله سوم برای متوسط‌گیری

و استخراج نتایج، شبیه‌سازی به میزان ۰/۲۲۵ ns ادامه یافته است. با توجه به مطالب گفته شده مدت‌زمان کل شبیه‌سازی این سیستم برابر با ۱/۶ ns است که برابر با ۱۶۰۰۰۰۰ گام زمانی است. اطلاعات مربوط به مدل نانولوله‌ها، مخازن و ابعاد شبیه‌سازی، در جدول (۲) آمده است (Rizzuto et al., 2018).

جدول ۲- اطلاعات و ابعاد مدل مخازن، آب و نانولوله‌های شبیه‌سازی شده

Table 2 The model dimensions of simulated tanks, water and nanotubes

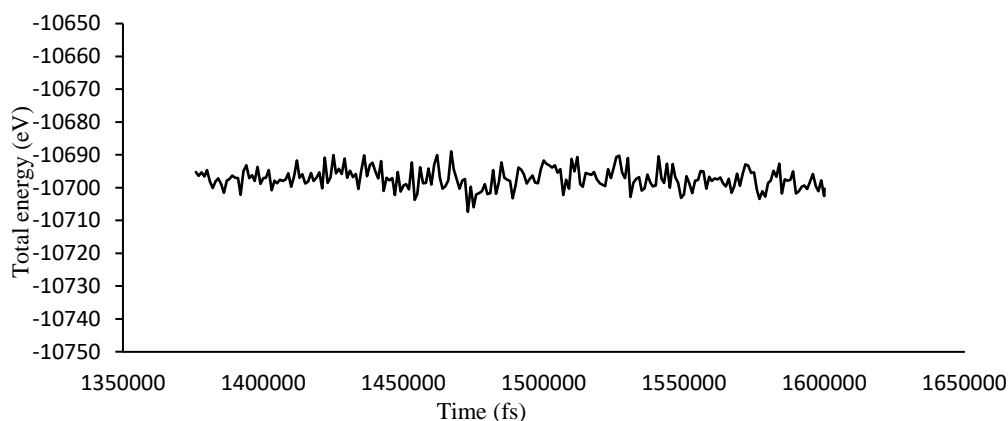
Type of Nanotube	Dimensions of Graphene (Å)	Inner Diameter of Nanotube (Å)	Length of Nanotube (Å)	Dimensions of Water Reservoirs (Å)
Nanotube 6,6	54×54	8.14	19.68	54×54×51
Nanotube 8,8	54×54	10.85	19.68	54×54×51

(۱۰،۱۰) با فشار رانش ۴۰۰ MPa نشان داده شده است. پس از طی ۲۲۵ هزار گام زمانی، متوسط انرژی کل سیستم ثابت شده است که نشان‌دهنده رسیدن سیستم به تعادل ترمودینامیکی است. همان‌گونه که در شکل (۲) مشاهده می‌شود این تعادل تا انتهای شبیه‌سازی برقرار است.

### ۳- یافته‌ها و بحث

#### ۳-۱- به تعادل رسانی

بررسی به تعادل رسیدن خواص (همگرایی مسئله) یکی از شروط صحت شبیه‌سازی است که در این قسمت به آن پرداخته شده است. در شکل (۲) نمودار تغییرات انرژی کل سیستم برحسب زمان برای سیستم متشکل از چهار نانولوله



شکل ۲- نمودار تغییرات انرژی کل سیستم نسبت به زمان

Fig. 2 Changes of the whole system energy over time

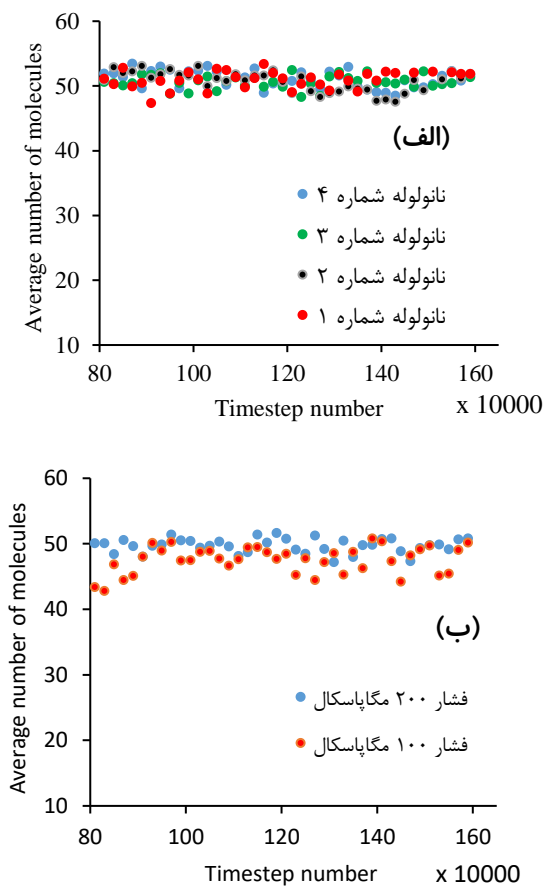
شرایط پژوهش (Rizzuto et al., 2018)، انجام شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی و مقایسه آن‌ها با مقاله مرجع در شکل (۳) برای نانولوله (۶،۶) و نانولوله (۸،۸) آمده است. همان‌طور که در شکل (۳) مشاهده می‌شود، در شبیه‌سازی پژوهش حاضر برای هر دو یون  $\text{Na}^+$  و  $\text{Cl}^-$  مقدار نمک‌زدایی با استفاده از نانولوله (۶،۶)، ۱۰۰٪ و با استفاده از نانولوله (۸،۸)، ۹۷/۱٪ به دست آمده است. ملاحظه می‌شود که نتایج با مقاله (Rizzuto et al., 2018) برای نانولوله (۶،۶)

#### ۳-۲- اعتبارسنجی

اعتبارسنجی مسئله موردنظر با توجه به پژوهش (Rizzuto et al., 2018) شد. پژوهش یادشده مشابهت زیادی با مطالعه حاضر داشته و می‌تواند به عنوان مرجع اعتبارسنجی تلقی شود. در این پژوهش نمک‌زدایی با استفاده از نانولوله‌های کربنی تک جداره و چند جداره در فشار ۴۰۰ MPa و در اندازه‌های مختلف از لحاظ قطر، مورد مطالعه قرار گرفته است. شبیه‌سازی‌های مربوط به اعتبارسنجی در شرایطی مشابه با



متوسط‌گیری زمانی در هر ۱۰۰۰۰ گام زمانی و معادل با ps ۱۰ است.

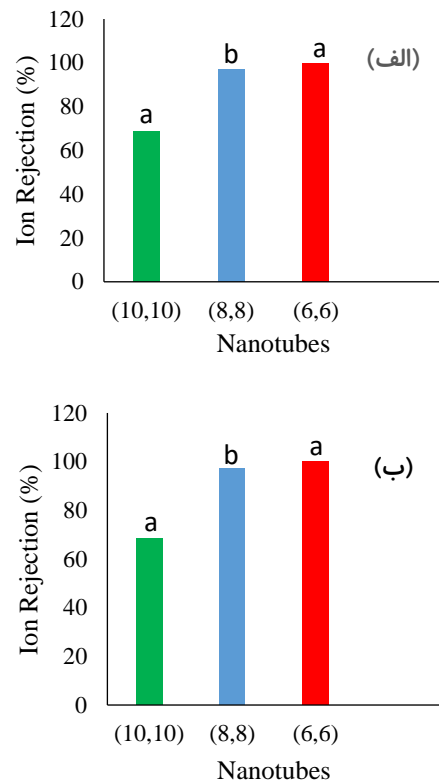


شکل ۴- متوسط تعداد مولکول‌های آب در نانولوله‌ها (الف) فشار ۴۰۰ MPa و مقایسه چهار نانولوله (ب) در فشارهای ۱۰۰ MPa و ۲۰۰ MPa در یکی از نانولوله‌ها

Fig. 4 Average number of water molecules in nanotubes a) at 400 MPa for each of 4 tubes b) for a tube at 100 and 200 MPa

از شکل (۴ الف) مشخص است که جریان مولکول‌های آب در تمامی نانولوله‌ها برقرار است. همچنین به‌طور متوسط، تعداد مولکول‌های آب عبوری از هر یک از نانولوله‌ها به مقدار ثابتی رسیده است که نشان‌دهنده به تعادل رسیدن حل و جریان است. این موضوع تأیید دیگری بر صحت شبیه‌سازی است. در شکل (۴ ب) تغییرات متوسط تعداد مولکول‌های آب در نانولوله شماره ۱ در فشارهای مختلف نشان داده شده است. با توجه به شکل، مشاهده می‌شود که تغییرات فشار تأثیر چندانی روی تعداد مولکول‌های آب عبوری از نانولوله نمی‌گذارد. این موضوع نشان‌دهنده برقراری خاصیت تراکم آب در ابعاد نانومتری است.

اختلافی ندارند و برای نانولوله (۸,۸) اختلاف، کم‌تر از ۵٪ است.



شکل ۳- مقایسه میزان دفع یون در شبیه‌سازی پژوهش حاضر (a) و Rizzuto et al. (2018) (b) برای نانولوله‌های مختلف: (الف) یون  $Na^+$  و (ب) یون  $Cl^-$

Fig. 3 Comparing between Ion rejection of nanotubes between the present study (a) and Rizzuto et al. (2018) (b) for a)  $Na^+$  and b)  $Cl^-$

### ۳-۳- اثر تغییر فشار رانش

اولین عاملی که تأثیر آن بر تصفیه بررسی می‌شود، فشار رانش است. قبل از آنکه اثر فشار بر میزان آب عبوری مطالعه شود، اثر فشار بر تغییرات متوسط تعداد مولکول‌های آب در داخل لوله مورد بررسی قرار می‌گیرد. در ابتدا تغییرات متوسط تعداد مولکول‌های آب در نانولوله برای یک سیستم چهار نانولوله‌ای مانند شکل (۱ ب) بررسی می‌شود. در شکل (۴) تغییرات متوسط تعداد مولکول‌های آب در طول نانولوله برحسب زمان مشاهده می‌شود. این نمودار برای سیستم متشکل از نانولوله‌های (۱۰,۱۰) در فشار ۴۰۰ MPa ترسیم شده است. متوسط‌گیری تعداد مولکول‌های آب از نوع

سیستم توان غلبه سیستم بر انرژی دافعه پتانسیل بین‌اتمی اتم‌های کربن از یک سو و سدیم و کلر از سوی دیگر، کاهش می‌یابد. لذا توان لازم برای عبور از سد انرژی پتانسیل برای عبور عناصر مذکور از نانولوله کربنی کمتر شده و میزان کمتری از اتم‌های سدیم و کلر از لوله عبور می‌کنند. در نتیجه یون‌زدایی نانولوله در فشارهای کمتر افزایش می‌یابد. از آنجاکه علاوه بر میزان نمک‌زدایی، مقدار شار آب عبوری از نانولوله نیز برای یک غشاء در فرایند تصفیه مهم است، برای قضاوت راجع به فشار بهینه رانش می‌بایست علاوه بر نمودارهای نمک‌زدایی، به نمودارهای دبی آب عبوری در فشارهای مختلف نیز توجه شود. برای محاسبه مقدار دبی آب عبوری از نانولوله، از رابطه (۵) استفاده شد (Rizzuto et al. 2018).

$$Q = \frac{\bar{v}N}{V} \quad (5)$$

که،  $\bar{v}$  سرعت متوسط یک مولکول در نانولوله،  $N$  تعداد مولکول‌ها و  $V$  حجم نانولوله است. در قسمت اول بخش نتایج، تعداد مولکول‌های آب داخل نانولوله به همراه نمودارهای مربوطه مورد بحث و بررسی قرار گرفت. سرعت متوسط یک مولکول آب در نانولوله، از متوسط‌گیری زمانی سرعت تمامی مولکول‌هایی که در یک لحظه خاص در داخل نانولوله قرار گرفته‌اند به دست می‌آید. شعاع نانولوله (۱۰،۱۰) برابر با  $7.8/6 \text{ \AA}$  و حجم نانولوله (۱۰،۱۰) استفاده شده در شبیه‌سازی  $2/74 \text{ nm}^3$  است. با جایگذاری اعداد به دست آمده در رابطه (۵) مقدار دبی در فشارهای مختلف را می‌توان به دست آورد. جدول (۴) اثر تغییرات فشار بر دبی عبوری از نانولوله‌های مختلف را نشان می‌دهد. با توجه به این جدول دیده می‌شود که فشار رانش به شدت بر دبی عبوری اثرگذار است. به طوری که با افزایش فشار رانش، دبی آب عبوری از نانولوله افزایش می‌یابد. با افزایش فشار رانش سرعت آب افزایش پیدا کرده در نتیجه با استناد به رابطه (۵) دبی نیز افزایش می‌یابد. قبلاً مشاهده شد که افزایش فشار باعث کاهش یون‌زدایی شده است. بنابراین می‌بایست بسته به نیاز، در یک طراحی مناسب، مصالحه‌ای بین دو اثر مذکور ایجاد شود. در یک فیلتر با مساحت  $1 \text{ cm}^2$  حدود ۱۰۰ میلیارد نانولوله (۱۰،۱۰) قرار دارد. بنابراین تقریباً برای یک فیلتر با مساحت  $1 \text{ m}^2$  مترمربع که از نانولوله (۱۰،۱۰) تشکیل شده است دبی آب عبوری در فشار ۱۰۰ MPa برابر با  $7 \text{ ml/s}$  است.

موضوع دیگری که شایان توجه است نحوه حرکت مولکول‌ها درون نانولوله کربنی است. شکل (۱ ج) این نحوه حرکت را نشان می‌دهد. با دقت در شکل مشخص می‌شود که مولکول‌های آب تقریباً به صورت منظم و در دو ردیف متمایز درون نانولوله حرکت می‌کنند. در واقع دولایه مجزا شکل گرفته است که مولکول‌ها تمایل به حرکت در یکی از این دولایه دارند. به این پدیده، پدیده لایه‌ای شدن گفته می‌شود که در جریان‌های درون نانو مجرا اتفاق می‌افتد (Sahebi and Azimian 2015). این پدیده سبب می‌شود که مولکول‌ها به صورت زنجیره‌ای و پشت سر هم حرکت کنند. این موضوع سبب کاهش حرکت کاتوره‌ای مولکول‌ها و کاهش برخورد آن‌ها به دیواره‌های کانال شده و در نتیجه اصطکاک و افت فشار جریان را کاهش می‌دهد. حرکت زنجیره‌ای مولکول‌های آب به سبب وجود پیوند هیدروژنی قوی میان مولکول‌های آب از یک طرف و دافعه میان اتم‌های کربن و مولکول آب است (Majumder et al. 2005). جدول (۳) مقدار یون‌زدایی نانولوله (۱۰،۱۰) در فشارهای ۴۰۰، ۲۰۰ و ۱۰۰ MPa را نشان می‌دهد.

جدول ۳- درصد یون‌زدایی نانولوله کربنی (۱۰،۱۰) در فشارهای مختلف

Table 3 carbon nanotube ion-rejection (10, 10) at various pressures (MPa)

Pressure	Na <sup>+</sup> rejection rate (%)	Cl <sup>-</sup> deionization rate (%)
400	68.5	60
200	85.7	77
100	97	97

با توجه به جدول (۳)، ملاحظه می‌شود که فشار رانش بر یون‌زدایی نانولوله‌ها تأثیر بسزایی دارد. با کاهش فشار رانش میزان یون‌زدایی افزایش می‌یابد به طوری که در فشارهای رانش کم‌تر از ۱۰۰ MPa مقدار یون‌زدایی به ۱۰٪ می‌رسد. این نتیجه با نتایج به دست آمده از پژوهش Zhang (2020) et al. همخوانی دارد. علت این موضوع را به صورتی که در پی می‌آید می‌توان تشریح کرد. کار ترمودینامیکی از طریق رابطه (۴) به دست می‌آید.

$$W = \int_{v_1}^{v_2} P dv \quad (4)$$

که،  $W$  نشان‌دهنده کار ترمودینامیکی بر حسب فشار  $P$  و دیفرانسیل حجم  $v$  است. با توجه به رابطه (۴) با کاهش فشار در یک دیفرانسیل حجمی مشخص کار سیستم و در نتیجه انرژی کل سیستم کاهش می‌یابد. با کاهش انرژی کل

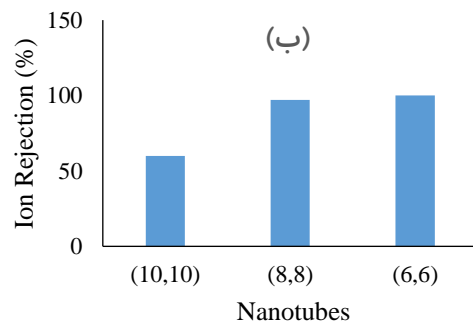
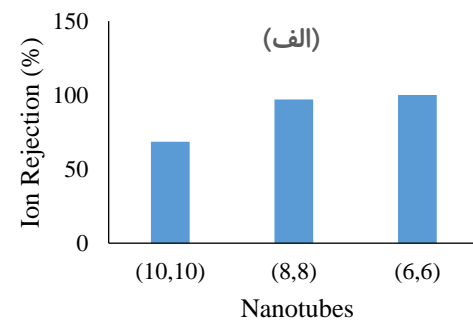
۳-۴- اثر تغییر قطر نانولوله

جدول (۴) دبی ایجادشده در نانولوله به ازای یک فشار مشخص را در قطرهای مختلف نشان می‌دهد. همان‌گونه که دیده می‌شود، با افزایش قطر نانولوله دبی افزایش می‌یابد. افزایش قطر نانولوله سبب کاهش مقاومت اصطکاکی نانولوله نسبت به جریان، افزایش حجم نانولوله و افزایش تعداد مولکول‌های آب در نانولوله می‌شود. مجموع اثرهای یادشده سبب افزایش دبی خواهد شد. یعنی درنهایت زنجیره‌های مولکولی آب بیش‌تری در نانولوله تشکیل می‌شود.

جدول ۴- تغییرات دبی برحسب نوع نانولوله در فشارهای مختلف  
Table 4 Flow rate depending on the type of nanotube at different pressures (MPa)

Pressure	Nanotube (Flow rate = 1/ns.nm <sup>2</sup> )		
	6,6	8,8	10,10
400	2186	4966	9421
200	1262	3146	4245
100	841	1547	1929

اثر قطر نانولوله بر یون‌زدایی برای سه نانولوله (۶,۶) و (۸,۸) و (۱۰,۱۰) در فشار ۴۰۰ MPa در شکل (۵) بررسی و با یکدیگر مقایسه شده‌اند. همان‌طور که انتظار می‌رود، با کوچک شدن قطر نانولوله، درصد یون‌زدایی افزایش می‌یابد و درنهایت به نزدیک ۱۰۰٪ می‌رسد. بنابراین کوچک‌تر کردن بیش‌تر قطر در میزان یون‌زدایی تأثیری نمی‌گذارد.

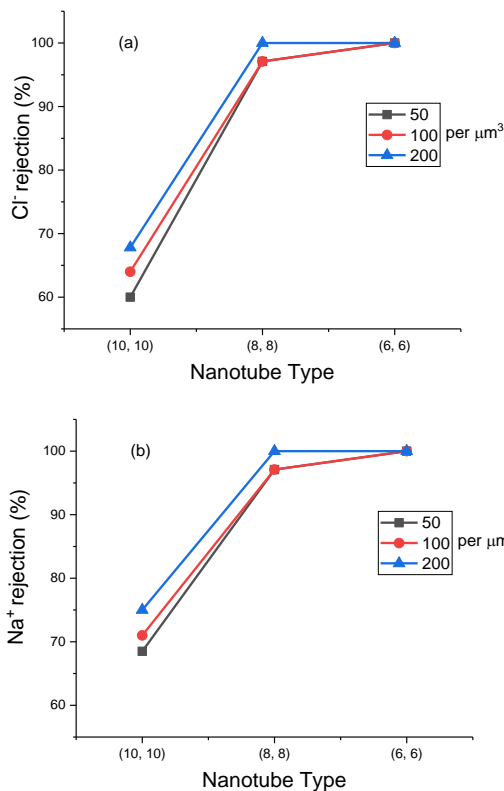


شکل ۲- اثر قطر نانولوله بر یون‌زدایی در فشار ۴۰۰ MPa: الف- یون سدیم و ب- یون کلر

Fig. 5 Effect of nanotube diameter on ion-rejection at a pressure of 400 MPa a) Sodium Ion b) Chloride Ion

۳-۵- اثر تغییر تخلخل غشاء

در این قسمت اثر تخلخل بر یون‌زدایی مورد بحث قرار گرفته است. تخلخل معیاری برای تعیین میزان فضای خالی نسبت به فضای کل ماده است. تغییر تخلخل، با تغییر تعداد نانولوله در مساحت مشخصی از سطح گرافن (به‌عنوان سطح غشا) شبیه‌سازی شده است. هر چه تعداد نانولوله‌ها بیشتر شود مقدار فضای ایجادشده در صفحه گرافن نیز بیشتر می‌شود. در شکل (۶) نمودار اثر تغییر تخلخل بر یون‌زدایی نانولوله ترسیم شده است. این نمودار برای سه میزان مختلف از تعداد نانولوله بر واحد سطح رسم شده است که عبارت‌اند از: ۵۰، ۱۰۰ و ۲۰۰ per  $\mu\text{m}^2$ .



شکل ۶- اثر تخلخل بر یون‌زدایی برای نانولوله‌های مختلف الف- یون سدیم و ب- یون کلر

Fig. 6 Effect of porosity on ion-rejection for different nanotubes a) Sodium Ion b) Chloride Ion

همان‌گونه که ملاحظه می‌شود، در هیچ‌کدام از نانولوله‌ها افزایش تخلخل تأثیر چشمگیری بر یون‌زدایی نداشته است و دلیل آن این است که، نقش اصلی در حذف یون‌ها بر عهده اندازه نانولوله است. بنابراین در یک اندازه مشخص از قطر نانولوله، تخلخل، تأثیر چندانی بر حذف یون‌ها ندارد. این موضوع، در مورد دبی صدق نمی‌کند. در نمودار شکل (۷) تأثیر تعداد نانولوله (تخلخل‌های مختلف) بر دبی مورد بررسی



قطر نانولوله، فشار اعمالی و میزان تخلخل موردسنجش قرار گرفته است. نتایج این پژوهش را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد:

۱- مولکول‌های آب از درون نانولوله به صورت یک زنجیره مولکولی منظم عبور می‌کنند. این موضوع سبب کاهش برخورد مولکول‌های سیال به دیواره و در نتیجه کاهش قابل توجه اصطکاک می‌شود. این امر نشان‌دهنده مزیت استفاده از نانولوله کربنی در فرایند تصفیه غشایی - که معمولاً به سبب اصطکاک بالای جریان عبوری از فیلتر، به نیروی پمپاژ زیادی احتیاج می‌شود - است.

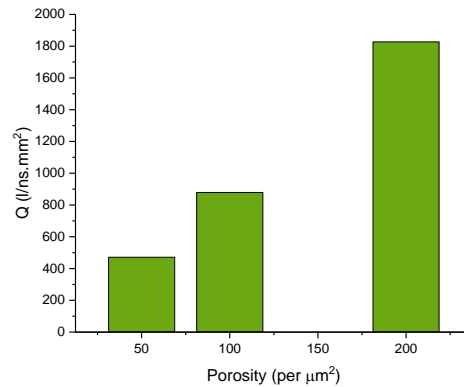
۲- در محدوده فشار موردبررسی (۱۰۰ MPa تا ۴۰۰ MPa)، کاهش فشار تصفیه موجب افزایش دفع نمک می‌شود. به طوری که برای هر سه نوع نانولوله (۶،۶)، (۸،۸) و (۱۰،۱۰)، در فشار ۱۰۰ MPa میزان دفع نمک در همه نانولوله‌ها به حداکثر میزان خود یعنی ۱۰۰٪ رسید.

۳- افزایش میزان تخلخل غشاء برای یک نانولوله مشخص تأثیری در میزان نمک‌زدایی ندارد اما به شدت دبی آب عبوری را افزایش می‌دهد.

۴- نتایج همچنین نشان داد که اگر از هندسه بررسی شده در این پژوهش در مورد نانولوله (۱۰،۱۰) به عنوان یک فیلتر استفاده شود دبی آب عبوری در فشار ۱۰۰ MPa برابر با ۷ ml/s به ازای سطح مقطع واحد از فیلتر خواهد بود.

نتایج این پژوهش نشان‌دهنده میزان مطلوب دفع نمک و نیز کاهش فوق‌العاده اصطکاک در جریان آب عبوری از نانولوله کربنی است. این مسئله به معنای کاهش نیروی پمپاژ در فرایند تصفیه است. بنابراین نانولوله‌های کربنی برای استفاده در تصفیه آب پتانسیل بالایی از خود نشان می‌دهند. برای بررسی بیشتر و همچنین نزدیک‌تر شدن بررسی‌ها به فرایندهای واقعی پیشنهاد می‌شود عبور آب از فیلترهای حاوی نانولوله‌های کربنی که با جهت عبور آب از فیلتر دارای زوایای متفاوتی هستند مورد شبیه‌سازی قرار گیرد. همچنین می‌توان استفاده از انواع دیگر نانولوله‌ها مثل نانولوله‌های دوجداره و چند جداره را مورد بررسی قرارداد. عامل دار کردن نانولوله‌ها به منظور بهینه کردن فرایند دفع یون نیز از دیگر موضوعاتی است که برای پژوهش‌های آتی پیشنهاد می‌شود.

قرار گرفته است. همان‌طور که دیده می‌شود، افزایش تخلخل تأثیر زیادی بر دبی آب عبوری دارد. لذا می‌توان نتیجه گرفت، تا جایی که مسائل مربوط به ساختارهای مکانیکی اجازه می‌دهد می‌بایست از فیلترهای با تخلخل بالاتر استفاده شود.



شکل ۷- اثر تخلخل (تعداد نانولوله در واحد سطح) بر دبی برای نانولوله (۱۰، ۱۰) در فشار ۴۰۰ MPa

Fig. 7 Effect of porosity on flow rate in 400 MPa for (10, 10) nanotube

با وجود پژوهش‌های انجام‌شده برای روشن شدن عملکرد نانولوله‌های کربنی در تصفیه آب، سازوکارهای فیزیکی تصفیه هنوز به طور کامل روشن نیستند (Ang et al. 2020). از این رو مجموعه بررسی‌های انجام‌شده در این پژوهش را به عنوان تکمیل‌کننده پژوهش‌های محققان در راستای درک بهتر عملکرد مولکولی نانولوله‌های کربنی در فرایند تصفیه آب از محلول آب و نمک می‌توان در نظر گرفت. همچنین، با وجود تفاوت محدوده فشار رانش موردبررسی در پژوهش حاضر با پژوهش‌های پیشین، تأثیر فشار رانش بر عملکرد تصفیه از لحاظ کیفی به خوبی با نتایج به دست آمده از پژوهش‌های قبلی (به طور مثال با پژوهش Zhang et al. (2020) همخوانی داشته و نتایج قبلی را تأیید می‌کند. در مورد بررسی اثر میزان تخلخل، تا جایی که نویسندگان مطلع هستند - به نظر می‌رسد کارهای اندکی انجام شده باشد و بررسی اثر یادشده در این پژوهش باعث افزایش اطلاعات در این زمینه شده است.

#### ۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش مسئله تصفیه آب از محلول آب و نمک به وسیله فیلترهای متشکل از نانولوله‌های کربنی مورد بررسی قرار گرفته است. این پژوهش به وسیله روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام شد. هدف از این بررسی روشن شدن سازوکار تصفیه در مقیاس مولکولی و آزمودن میزان تأثیر عوامل مؤثر بر فرایند بوده است. بدین منظور عواملی همچون

## دسترسی به داده‌ها

داده‌های استفاده‌شده و یا تولیدشده در این تحقیق در متن مقاله ارائه‌شده است.

## تضاد منافع نویسندگان

نویسندگان این مقاله اعلام می‌دارند که، هیچ‌گونه تضاد منافی در رابطه با نویسندگی و یا انتشار این مقاله ندارند.

## References

- AbdAllah, A., El-Sallamy, W., Azzam, B. and Osman, T. (2020). Improving water desalination efficiency by using carbon nanotubes as pre-treatment. In IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 973(1), 012016. DOI: 10.1088/1757-899X/973/1/012016/meta
- Abdelkareem, M. A., Assad, M. E. H., Sayed, E. T. and Soudan, B. (2018). Recent progress in the use of renewable energy sources to power water desalination plants. *Desal.*, 435, 97-113. DOI: 10.1016/j.desal.2017.11.018
- Adibfar, A. and Shirkhodaie, E. (2010). Water desalination: Principles and Methods. Pendar e Pars, Tehran [In Persian].
- Ahmad, A. and Azam, T. (2019). Water purification technologies. In *Bottled and Packaged Water* (pp. 83-120). Woodhead Publishing. DOI: 10.1016/B978-0-12-815272-0.00004-0
- Ali, A., Tufa, R. A., Macedonio, F., Curcio, E. and Drioli, E. (2018). Membrane technology in renewable-energy-driven desalination. *Renew. Sustain. Energy Rev.*, 81, 1-21. DOI: 10.1016/j.rser.2017.07.047
- Ang, E.Y., Toh, W., Yeo, J., Lin, R., Liu, Z., Geethalakshmi, K. R. and Ng, T. Y. (2020). A review on low dimensional carbon desalination and gas separation membrane designs. *J. Membr. Sci.*, 598, 117785. DOI: 10.1016/j.memsci.2019.117785
- Gupta, S., Henson, A., Evans, B. and Meek, R. (2019) Graphene-based aerogels with carbon nanotubes as ultrahigh-performing mesoporous capacitive deionization electrodes for brackish and seawater desalination. *Water Desal. Treat.*, 162, 97-111. DOI: 10.5004/dwt.2019.24338
- Hadidi, H. and Kamali, R. (2020). Non-equilibrium molecular dynamics simulations of water transport through plate-and hourglass-shaped CNTs in the presence of pressure difference and electric field. *Comput. Mater. Sci.*, 185, 109978. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109978
- Hollingsworth, S. A. and Dror, R. O. (2018) Molecular dynamics simulation for all. *Neuron*, 99(6), 1129-1143. DOI: 10.1016/j.neuron.2018.08.011
- Hong, Y., Zhang, J., Zhu, C., Zeng, X. and Francisco, J. (2019). Water desalination through rim functionalized carbon nanotubes. *J. Mater. Chem. A*, 7(8), 3583-91. DOI: 10.1039/C8TA10941A
- Lim, Y. J., Goh, K., Kurihara, M. and Wang, R., (2021). Seawater desalination by reverse osmosis: Current development and future challenges in membrane fabrication—A review. *J. Membr. Sci.*, 629, 19292. DOI: 10.1016/j.memsci.2021.119292
- Liu, Y., Xie, D., Song, M., Jiang, L., Fu, G., Liu, L. and Li, J. (2018). Water desalination across multilayer graphitic carbon nitride membrane: Insights from non-equilibrium molecular dynamics simulations. *Carbon*, 140, 131-138. DOI: 10.1016/j.carbon.2018.08.043
- Majumder, M., Chopra, N., Andrews, R. and Hinds, B. J. (2005). Enhanced flow in carbon nanotubes. *Nat.*, 438(7064), 44-44. DOI: 10.1038/438044a.
- Mayo, S., Olafson, B. and Goddard, W. (1990). DREIDING: a generic force field for molecular simulations. *J. Phys. Chem.*, 94(26), 8897-909. DOI: 10.1021/j100389a010
- Mendonca, B. H., de Freitas, D. N., Köhler, M. H., Batista, R. J., Barbosa, M. C. and de Oliveira, A. B. (2019). Diffusion behaviour of water confined in deformed carbon nanotubes. *Phys. A: Statist. Mechanic. Appl.*, 517, 491-498. DOI: 10.1016/j.physa.2018.11.042
- Panahi, A., Shomali, A., Sabour, M. H. and Ghafar-Zadeh, E. (2019). Molecular dynamics simulation of electric field driven water and heavy metals transport through fluorinated carbon nanotubes. *J. Mole. Liq.*, 278, 658-671. DOI: 10.1016/j.molliq.2019.01.084
- Plimpton, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *J. Comput.*





- Phys., 117(1), 1–19. DOI: 10.1006/jcph.1995.1039
- Qu, X., Alvarez, P. J. and Li, Q. (2013). Applications of nanotechnology in water and wastewater treatment. *Water Res.*, 47(12), 3931-3946. DOI: 10.1016/j.watres.2012.09.058
- Rice, W. and Hirschfelder, J. (1954). Second virial coefficients of gases obeying a modified Buckingham (exp—six) potential. *J. Chem. Phys.*, 22(2), 187-92. DOI: 10.1063/1.1740027
- Rizzuto, C., Pugliese, G., Bahattab, M., Aljlil, S., Drioli, E. and Tocci, E. (2018). Multiwalled carbon nanotube membranes for water purification. *Separat. Purif. Technol.*, 193, 378-85. DOI: 10.1016/j.seppur.2017.10.025
- Roy, K., Mukherjee, A., Maddela, N. R., Chakraborty, S., Shen, B., Li, M., Du, D., Peng, Y., Lu, F. and Cruzatty, L. C. G. (2020). Outlook on the bottleneck of carbon nanotube in desalination and membrane-based water treatment—a review. *J. Environ. Chem. Eng.*, 8(1), 103572. DOI: 10.1016/j.jece.2019.103572
- Sahebi, M. and Azimian, A. R. (2015). Effect of some geometrical characteristics of asymmetric nanochannels on acceleration-driven flow. *Microfluid. Nanofluid.*, 18(5), 1155-1163. DOI: 10.1007/s10404-014-1508-6
- Sam, A., Prasad, V. and Sathian, S.P. (2019). Water flow in carbon nanotubes: the role of tube chirality. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 21(12), 6566-6573. DOI: 10.1039/C9CP00429G
- Sobhanardakani, S., Maànijou, M. and Asadi, H. (2015). Investigation of Pb, Cd, Cu and Mg concentrations in groundwater resources of Razan Plain. *J. Hamadan Univ. Med. Sci.*; 21(4), 319-29 [In Persian].
- Tao, J., Song, X., Zhao, T., Zhao, S. and Liu, H. (2018). Confinement effect on water transport in CNT membranes. *Chem. Eng. Sci.*, 192, 1252-1259. DOI: 10.1016/j.ces.2018.05.018
- Yang, Y., Dementyev, P., Biere, N., Emmrich, D., Stohmann, P., Korzetz, R., Zhang, X., Beyer, A., Koch, S., Anselmetti, D. and Götzhäuser, A. (2018). Rapid water permeation through carbon nanomembranes with sub-nanometer channels. *ACS Nano*, 12(5), 4695-4701. DOI: 10.1021/acsnano.8b01266
- Zhang, X., Wei, M., Xu, F. and Wang, Y. (2020). Pressure-dependent ion rejection in nanopores. *J. Phys. Chem. C*, 124(37), 20498-20505. DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c03641

### How to cite this paper:

Ghader, O. and Sahebi, M. (2022). Molecular dynamics simulating the performance of carbon nanotubes in water desalination. *Environ. Water Eng.*, 8(3), 608–621. DOI: 10.22034/JEWE.2022.305466.1631

