رتبه سوم پنجمین دوره مسابقه پایان‌نامه برتر سال ۱۳۹۹ در مقطع دکتری
(برگزار شده توسط انجمن آب و فاضلاب ایران)

دانشگاه شهید چمران اهواز

دانشکده علوم، گروه شیمی

عنوان: سنتز، مشخصه‌یابی و مدل‌سازی ریاضی نانو فوتوکاتالیست‌های بر پایه $Fe3O_4$ و بررسی سینتیکی عملکرد آن‌ها در تخریب و حذف آلاینده‌های آلی

نگارش: زهرا عباسی چیکان سفلی
استاد راهنما: دکتر عبدالهادی فرخ‌نیا
استادان مشاور: دکتر ایلزا ایزابل گارسیا لوپز و دکتر مرتضی زرگر شوشتری

تاریخ: بهمن ۱۳۹۸

چکیده

دستیابی به راندمان تخریب فوتوکاتالیستی بالا به‌دلیل بازترکیبی سریع حامل‌های بار در فوتوکاتالیست ناهمگن بعد از اتمام واکنش، از محدودیت های روش های اکسایش پیشرفته است. توسعه فوتوکاتالیست‌های ناهمگن با اتصال دو نیم‌رسانا با موقعیت لبه باند مناسب، می‌تواند با انتقال الکترون-حفره، پدیده‌های بازترکیبی را کاهش دهد. برای توسعه جاذب‌ها، استفاده از مواد مغناطیس به‌منظور تهیه جاذب مغناطیسی برای سهولت در جدا کردن جاذب از محلول واکنش، می‌تواند روشی کارآمد باشد. برای توصیف چشم اندازهای جدید در زمینه‌ی تصفیه پساب، پنج ساختار دو بعدی ناهمگن متفاوت، فوتوکاتالیست‌های $g\text{-}C_3N_4/Fe_3O_4/TiO_2$، $Fe_3O_4@rGO/ZnO/Ag_2CO_3$، $Fe_3O_4@Bi_2O_3/g\text{-}C_3N_4$ و $g\text{-}C_3N_4\text{-}Mcy$ و جاذب $Fe_3O_4@HA/MMT$ با روش های رفلاکس، حلال حرارتی، تابش ماکروویو، روش رسوب‌دهی شیمیایی در شرایط تاریک و تراکم حرارتی با موفقیت تهیه شده است. نمونه‌های تهیه شده به‌وسیله روش‌های پراش پرتو ایکس (XRD)، میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM)، طیف‌سنج مادون قرمز تبدیل فوریه (FT-IR)، تعیین مساحت سطح ویژه (SSA)، میکروسکوپ الکترونی گسیل میدانی (FESEM)، میکرو سکوپ الکترونی روبشی (SEM)، مغناطیس‌سنج نمونه ارتعاشی (VSM)، آنالیز تفرق دینامیکی نور (DLS)، طیف جذبی UV-Visible، BET و BJH شناسایی شده است. فعالیت فوتوکاتالیست‌های تهیه شده با مطالعه سینتیک تخریبی آلاینده‌های آلی متیلن بلو، ایندیگوکارمین، سافرانین، دایرکت بلو و ۴-نیتروفنول و بررسی فعالیت جاذب در میزان حذف رنگ متیل اورانژ بررسی شده است. به‌منظور دستیابی به بهینه پارامترهای موثر مورد نظر از روش سطح پاسخ (RSM) استفاده شده است. مکانیسم تخریب با استفاده از فوتوکاتالیست $g\text{-}C_3N_4/Fe_3O_4/TiO_2$ نشان داده است که حضور ۵٪ وزنی از اکسید آهن در ساختار فوتوکاتالیست سبب کاهش بازترکیبی الکترون- حفره، انتقال الکترون بین دو نیم‌رسانا و تسریع‌کننده تخریب متیلن بلو شده است. سینتیک تخریب متیلن بلو با فوتوکاتالیست مغناطیسی $Fe_3O_4@rGO$ core-shell -ZnO sheet/Ag_2CO_3 نشان داد که Ag_2CO_3 در افزایش سرعت تخریب متیلن بلو تأثیر مثبت داشته است. با بررسی گروه‌های فعال در واکنش تخریب با استفاده از فوتوکاتالیست $Fe_3O_4@Bi_2O_3/g\text{-}C_3N_4$ تاثیر مثبت نقش $^{\bullet}OH$، $^{\bullet}O_2^-$ و h^+ در تخریب فوتوکاتالیستی مشخص شده است. سینتیک و مکانسیم تخریب ۴-نیتروفنول با $g\text{-}C_3N_4\text{-}MCy$ بررسی شده است و در بررسی سینتیکی، معادله سینتیک مرتبه اول نسبت به غلظت ۴-نیتروفنول به‌دست آمده است که با معادله لانگمویر-هینشل‌وود همخوانی دارد. از طرفی طبق رابطه به‌دست آمده اثبات شده است که عواملی مانند اکسیژن محلول و شدت تابش در سرعت واکنش مؤثر است که با یافته‌های آزمایشگاهی هم‌خوانی داشته است. در بررسی فعالیت $Fe_3O_4@HA/MMT$ به‌عنوان جاذب، مدل سینتیکی شبه مرتبه دوم بالاترین ضریب همبستگی را نشان داده است. بررسی هم‌دمای واکنش نشان داد که جذب متیل اورانژ بر روی جاذب، از ایزوترم فروندلیچ تبعیت کرده است.

کلمات کلیدی: هسته-پوسته، ساختار دو بعدی، تخریب نوری، سینتیک، مکانیسم تخریب.

رتبه اول پنجمین دوره مسابقه پایان‌نامه برتر سال ۱۳۹۹ در مقطع کارشناسی ارشد
(برگزار شده توسط انجمن آب و فاضلاب ایران)

دانشگاه تبریز
دانشکده مهندسی شیمی و نفت

عنوان: شبیه‌سازی راکتور بسترسیال به‌منظور حذف مواد رنگ‌زای آلی طی فرآیند فنتون هتروژن با استفاده از روش دینامیک سیالات محاسباتی

نگارش: مهدی ابراهیمی فرشچی
استاد راهنما: دکتر حسن اقدسی‌نیا
استاد مشاور: دکتر علیرضا ختائی

تاریخ: شهریور ۱۳۹۵

چکیده

در این تحقیق شبیه‌سازی فرآیند حذف ماده رنگ‌زای اسید زرد ۳۶ در راکتور بسترسیال به‌روش دینامیک سیالات محاسباتی مورد مطالعه قرار گرفته است. با مطالعه مکانیزم‌های تولید و مصرف اکسیژن و فرآیند فنتون هتروژن و مرتبط ساختن این دو پارامتر به یکدیگر، به یک زمان موثر واکنش فنتون هتروژن دست یافته شده که باعث کاهش حجم شبیه‌سازی و صرفه‌جویی در مدت زمان شبیه‌سازی شد. در مرحله بعدی این مطالعات برای بررسی تاثیر هیدرودینامیک بر روی واکنش‌ها، مدل‌سازی سینتیکی فرآیند انجام شد. برای بهبود مدل‌سازی سینتیکی پارامتری با نام β به‌عنوان نماینده مکانیزم‌های فیزیکی تولید و مصرف اکسیژن، نظیر تاثیر روی اکسیژن محلول، salt effection و انتقال جرم در اثر نیروی محرکه (اختلاف غلظت اکسیژن بین محیط و سیستم) به مدل اضافه شد که باعث کاهش درصد خطای مدل سینتیکی شد. نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی تطابق بسیار خوبی با نتایج آزمایشگاهی داشته و نسبت به نتایج مدل سینتیکی بهبودیافته، به نتایج آزمایشگاهی نزدیک‌تر است که علت آن کنترل‌کنندگی عامل اختلاط هیدرودینامیک سیستم بر روی برخی از واکنش‌های سینتیکی است.

کلمات کلیدی: شبیه‌سازی، راکتور بسترسیال، مواد رنگ‌زای آلی، فرآیند فنتون هتروژن، دینامیک سیالات محاسباتی.