

ارائه معادله‌ای جدید به منظور پیش‌بینی میزان جذب

مسعود نصیری^{۱*}، سارا عبدی^۲

۱- استادیار مهندسی شیمی، دانشگاه سمنان

۲- دانشجوی دکتری مهندسی شیمی، دانشگاه سمنان

تاریخ دریافت: ۹۲/۰۸/۰۲ تاریخ پذیرش: ۹۳/۰۹/۱۶

پیام نگار: mnasiri@semnan.ac.ir

چکیده

هدف از این تحقیق، بررسی ریاضی تجمیع مدل‌های همدمای جذب در یک معادله ۵ پارامتری است. این معادله می‌تواند همدماهای لانگمویر، فرنرلیچ، هیل، ردلیچ-پترسون، سیپس، تات، کوبله-کورینگان، خان و رادکه-پرازنیتز را در قالب یک معادله بیان کند. معادله یادشده، به کمک نرم‌افزارهای تحلیلی عددی رایج، با داده‌های تجربی برازش شده و نتایج به‌دست آمده با مقادیر مربوط به شکل ناخطی سایر همدماهای مقایسه شده است. برای یافتن بهترین همدمای جهت تطبیق بهتر با داده‌های تجربی، از روش‌های تحلیل خطا، همچون مجموع مربعات و ضریب همبستگی بهره گرفته شد. از میان داده‌های تجربی به کار رفته در این بررسی، بهترین نتایج مربوط به داده‌های آزمایش جذب آنیلین، فنل، متیلن آبی و کادمیم است؛ که نشان می‌دهد معادله یادشده، با داشتن کمترین مجموع مربعات خطا و بیشترین ضریب همبستگی، برای تطبیق نتایج تجربی معادله مناسبی است. نتایج به‌دست آمده افزایش تعداد پارامترهای یک معادله را در برازش بهتر داده‌های تجربی تایید می‌کند.

کلیدواژه‌ها: جذب سطحی، همدمای جذب، جذب فیزیکی، جذب شیمیایی

۱- مقدمه

با پیشرفت فناوری، انتشار فلزات سنگین در محیط‌زیست مشکلات فراوانی پدید آورده است. برای حذف این فلزات سنگین از محیط‌زیست روش‌های گوناگونی را به کار می‌گیرند که از جمله آن‌ها می‌توان به رسوب‌دهی شیمیایی، تبادل یون، جذب سطحی، صافش، لخته‌سازی و انعقاد اشاره کرد [۱].

از میان روش‌های یادشده، فرایند جذب سطحی مزایای بسیاری دارد که از آن جمله می‌توان دسترسی آسان، استفاده از زباله‌های زیستی و صنعتی به عنوان جاذب، هزینه‌های عملیاتی پایین، سهولت عمل در مقایسه با فرایندهای دیگر، باز مصرف جاذب پس از احیا، سازگاری با محیط‌زیست، و مقرون به صرفه بودن آن را برشمرد [۲]. جذب سطحی، فرایند جذب اتم‌ها یا مولکول‌های موجود در یک

مایع یا گاز در تماس با سطح جامد است. عمل جذب یا از طریق نیروهای وان‌دروالسی آغاز می‌شود که به آن جذب فیزیکی^۱ می‌گویند و یا به کمک نیروهای کووالانسی انجام می‌پذیرد، که در این حالت همراه با واکنش شیمیایی است و به آن جذب شیمیایی^۲ می‌گویند [۳].

یک همدمای جذب سطحی، مقدار تعادلی ماده جذب شده بر روی سطح جامد را با تغییرات فشار گاز یا غلظت، در دمای ثابت نشان می‌دهد. همدماهای جذب به منظور توصیف رفتار جاذب و بهینه کردن شرایط عملیاتی سیستم به کار می‌روند.

۱-۱ مدل‌های رایج در جذب سطحی

همدماهای جذب انواع گوناگونی دارند که از جمله پرکاربردترین آنها

1. Physical Adsorption
2. Chemisorption

* سمنان، دانشگاه سمنان، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز

نامعتبر بودن همدمای لانگمویر برای جذب چند لایه‌ای مولکول‌ها، همدمای بت را معرفی کردند. این همدمای توصیف جذب چندلایه‌ای مولکول‌های نیتروژن بر روی پایگاههای آلومینیم اکسید به کار می‌رود.

فرضهای به کار رفته در این همدمای عبارتند از:

- ۱- مولکول‌های گازی رفتاری آرمانی (کامل) دارند.
 - ۲- مولکول‌های مختلف نیتروژن می‌توانند به یک پایگاه جذب شوند.
 - ۳- هر مولکول جذب شده، یک پایگاه را برای جذب سطحی مولکول‌ها در بالای آن فراهم می‌آورد.
 - ۴- تمام پایگاهها روی سطح با هم برابرند.
 - ۵- هیچ برهم کنشی بین جاذب و جذب شونده برقرار نیست.
 - ۶- مولکول جذب شده بی‌حرکت خواهد ماند.
 - ۷- نیتروژن در لایه‌های دوم و بالاتر شبیه مایع فرض می‌شود [۶].
- فهرست همدمای جذب در جدول (۱) درج شده است.

پورتر^۸ و همکاران، در سال ۲۰۰۱، جذب یون‌های سه ظرفیتی مس، نیکل و سرب را از محلول‌های آبی بر روی زغال سنگ نارس، در سیستم‌های تک جزئی بررسی کردند و همدمای تعادلی را به دست آوردند. سپس، داده‌های تجربی را با بهره‌گیری از همدمای لانگمویر، فرندلیچ، ردلیچ-پترسون، تات، تمکین، دوپنین - رادوشکویچ و سیپس تحلیل کردند. به منظور تعیین بهترین همدمای در هر سیستم، از ۶ روش تحلیل خطای ضریب همبستگی^۹، مجموع مربعات خطا^{۱۰}، تابع خطای هیبرید^{۱۱}، درصد انحراف استاندارد مارکوارت^{۱۲}، خطای نسبی میانگین^{۱۳} و مجموع خطاهای مطلق^{۱۴} به منظور ارزیابی داده‌ها بهره گرفتند. نتایج تحلیل نشان داد که معادله سیپس بهترین مدل برای تحلیل داده‌های آزمایشگاهی است [۴]. ونکات^{۱۵} و همکاران در سال ۲۰۰۶، جذب سطحی رنگ سبز بریلیانت^{۱۶} روی خاکستر سبوس برنج را بررسی کردند.

در جذب سطحی گازها و مایعات، می‌توان به فرندلیچ^۱، لانگمویر^۲، تمکین^۳ و بت^۴ اشاره کرد.

۱-۱-۱ همدمای فرندلیچ

در سال ۱۹۰۶، فرندلیچ نخستین همدمای جذب را ارائه کرد. از این مدل تجربی می‌توان برای جذب ناآرمانی (ناقص) روی سطوح ناهمگن و نیز جذب‌های فیزیکی چندلایه بهره گرفت [۴].

۱-۱-۲ همدمای لانگمویر

در سال ۱۹۱۶، ایروینگ لانگمویر^۵ یک همدمای برای گازهای جذب شده روی جامدات منتشر کرد و نام خود را روی آن گذاشت. این همدمای بر پایه چهار فرض زیر استوار است:

۱. سطح جاذب یکنواخت است و تمام پایگاههای جذب برابرند.
 ۲. مولکول‌های جذب شده با یکدیگر بر هم کنش ندارند.
 ۳. تمام جذب سطحی از طریق یک سازوکار واحد رخ می‌دهد.
 ۴. در حداکثر جذب، تنها یک تک لایه تشکیل می‌شود: مولکول‌های جذب شونده روی مولکول‌های دیگر رسوب نمی‌کنند و فقط روی سطح آزاد جاذب جذب می‌شوند [۵].
- از این همدمای برای توصیف جذب شیمیایی و جذب‌های فیزیکی در غلظت‌های نسبتاً پایین استفاده می‌شود.

۱-۱-۳ همدمای تمکین

در این همدمای نادیده گرفتن غلظت‌های بسیار کم و بسیار زیاد، فرض می‌شود که گرمای جذب تمام مولکول‌ها در یک لایه، باید به صورت خطی و نه لگاریتمی، با پوشش سطحی ایجاد شده به دلیل برهم کنش‌های جذب شونده - جاذب، کاهش یابد. معادله تمکین برای پیش‌بینی تعادل فاز گاز بسیار مناسب است. ولی برای سیستم‌های جذب سطحی مرکب شامل فاز مایع مناسب نیست [۱].

۱-۱-۴ همدمای بت

در سال ۱۹۸۳، استفان براونر^۶، پاوول امت^۷ و ادوارد تله^۸، به دلیل

8. Edward Teller
9. Porter
10. Correlation Coefficient
11. Sum of Squared Errors
12. Hybrid Error Function
13. Marquardt's Percent Standard Deviation
14. The Average Relative Error
15. The Sum of Absolute Errors
16. Venkat
17. Brilliant Green

1. Freundlich
2. Langmuir
3. Tempkin
4. BET
5. Irving Langmuir
6. Stephan Brunauer
7. Paul Emmett

جدول ۱- ایزوترم‌های جذب سطحی [۱].

عبارت خطی	عبارت ناخطی	همدم
$\frac{C_e}{q_e} = \frac{1}{bQ_0} + \frac{C_e}{Q_0}$ $\frac{1}{q_e} = \frac{1}{Q_0} + \frac{1}{bQ_0 C_e}$ $q_e = Q_0 - \frac{q_e}{bC_e}$ $\frac{q_e}{C_e} = bQ_0 - bq_e$	$q_e = \frac{Q_0 b C_e}{1 + b C_e}$	لانگمویر
$\log q_e = \log K_f + \frac{1}{n} \log C_e$	$q_e = K_f C_e^{\frac{1}{n}}$	فرنرلیچ
$\ln(q_e) = \ln(q_s) - k_{ad} \varepsilon^2$	$q_e = (q_s) \exp(-k_{ad} \varepsilon^2)$	دوبینین-رادوشکوویچ ^۱
$q_e = \frac{RT}{b_T} \ln A_T + \left(\frac{RT}{b_T}\right) \ln C_e$	$q_e = \frac{RT}{b_T} \ln A_T C_e$	تمکین
$\log\left(\frac{\theta}{C_0}\right) = \log(K_{FH}) + n_{FH} \log(1 - \theta)$	$\frac{\theta}{C_0} = K_{FH} (1 - \theta)^{n_{FH}}$	فلوری - هاگینز ^۲
$\log\left(\frac{q_e}{q_{SH} - q_e}\right) = n_H \log(C_e) - \log(K_D)$	$q_e = \frac{q_{SH} C_e^{n_H}}{K_D + C_e^{n_H}}$	هیل ^۳
$\ln\left(K_R \frac{C_e}{q_e} - 1\right) = g \ln(C_e) + \ln(a_R)$	$q_e = \frac{K_R C_e}{1 + a_R C_e^g}$	ردلیچ - پترسون ^۴
$\beta_S \ln(C_e) = -\ln\left(\frac{K_S}{q_e}\right) + \ln(a_S)$	$q_e = \frac{K_S C_e^{\beta_S}}{1 + a_S C_e^{\beta_S}}$	سیپس ^۵
$\ln\left(\frac{q_e}{K_T}\right) = \ln(C_e) - \frac{1}{t} \ln(a_T + C_e)$	$q_e = \frac{K_T C_e}{(a_T + C_e)^{1/t}}$	تات ^۶
$\frac{1}{q_e} = \frac{1}{A C_e^n} + \frac{B}{A}$	$q_e = \frac{A C_e^n}{1 + B C_e^n}$	کوبله-کوریکان ^۷
----	$q_e = \frac{q_s b_K C_e}{(1 + b_K C_e)^{a_K}}$	خان ^۸
----	$q_e = \frac{a_{RP} r_R C_e^{\beta_R}}{a_{RP} + r_R C_e^{\beta_R - 1}}$	رادکه - پرازنیتز ^۹
$\frac{C_e}{q_e(C_S - C_e)} = \frac{1}{q_S C_{BET}} + \frac{(C_{BET} - 1) C_e}{q_S C_{BET} C_S}$	$q_e = \frac{q_S C_{BET} C_e}{(C_S - C_e)[1 + (C_{BET} - 1)(C_e / C_S)]}$	بت

1. Dubinin-Radushkevich
2. Flory-Huggins
3. Hill
4. Redlich-Peterson
5. Sips
6. Toth
7. Koble-Corrigan
8. Khan
9. Radke-Prausnitz

اسیدها و مخلوط آن‌ها با یون منگنز را روی نانولوله‌های کربن، با استفاده از چهار همدمای لانگمویر، فرن‌دلیچ، تمکین و هارکینس-جورا^۷ بررسی کردند. از میان این معادلات، فرن‌دلیچ و تمکین نمودار تعادلی مطلوبی را پیش‌بینی کردند [۱۲]. زمان شامحمدی حیدری^۸ در سال ۲۰۱۰، حذف سرب از محیط آبی را با بهره‌گیری از پوسته شلتوک، خاک اره و ساقه آفتابگردان مطالعه و بررسی کرد. داده‌های حاصل از آزمایش‌های همدمای جذب با بهره‌گیری از روش ضریب همبستگی، تجزیه و تحلیل شد. بنابر نتایج این تحلیل، مدل تمکین نسبت به مدل‌های لانگمویر و فرن‌دلیچ از برازش بهتری برخوردار است [۱۳]. پراساد^۹ و همکاران در سال ۲۰۱۱، جذب سطحی سلنیم را بر خاکستر پوسته برنج بررسی کردند. جاذب‌ها با محلول آهن کلرید برای حذف موثر سلنیم پوشیده شده بودند. آزمایش‌هایی ناپیوسته به منظور تعیین اثر مقدار جاذب، pH اولیه، زمان تماس و دما انجام گرفت. داده‌های جذب سطحی تعادلی با بهره‌گیری از همدماهای لانگمویر، فرن‌دلیچ و تمکین تحلیل شدند. نتایج ناشی از روش‌های تحلیل خطا نشان داد که همدمای فرن‌دلیچ، بهترین معادله منطبق با داده‌هاست [۱۴]. دادا^{۱۰} و همکاران در سال ۲۰۱۲، جذب سطحی روی را بر پوسته برنج اصلاح شده با فسفریک اسید بررسی کردند. داده‌های جذب تعادلی با همدماهای لانگمویر، فرن‌دلیچ، تمکین و دوبینین-رادوشکویچ تطبیق یافتند. از میان چهار همدمای یادشده، مقدار R² همدمای لانگمویر از بقیه بیشتر بود. بیشینه ظرفیت جذب به دست آمده از این مدل ۱۰۱/۰۱ میلی‌گرم بر گرم بود و فاکتور جداسازی ۰/۱۳۳، بیانگر یک جذب سطحی مناسب به‌شمار می‌آید [۱۵].

جینگ جینگ پی^{۱۱} و همکاران در سال ۲۰۱۲، جذب سطحی تولوئن را بر کربن فعال، در غلظت‌های پایین بررسی کردند. داده‌های تجربی را با استفاده از همدماهای لانگمویر، فرن‌دلیچ و دوبینین-رادوشکویچ تحلیل کردند که از میان آن‌ها لانگمویر به عنوان بهترین مدل برگزیده شد [۱۷]. داوودو^{۱۲} و همکاران در سال ۲۰۱۲، جذب سطحی یون‌های مس از محلول‌های آبی را بر نوعی خاک^{۱۳} بررسی کردند. هدف از این بررسی، بهره‌گیری از خاک به

داده‌های تعادلی جذب با بهره‌گیری از عبارت ناخطی همدماهای فرن‌دلیچ، لانگمویر، ردلیچ-پترسون، دوبینین-رادوشکویچ و تمکین تجزیه و تحلیل شدند. بنابر نتایج به دست آمده، بهترین مدل‌های سازگار با داده‌ها، عبارتند از لانگمویر و ردلیچ-پترسون [۷]. بوگو^۱ و همکاران در سال ۲۰۰۶، جذب سطحی کربن‌دی‌اکسید را بر کربن فعال خام A و سه نمونه کربن فعال اصلاح شده B، C و D در محدوده دمایی ۳۰۳ تا ۳۳۰ کلوین بررسی کردند. بنابر نتایج تحلیل، مدل دوبینین-رادوشکویچ بهترین مدل برای انطباق داده‌ها بر روی کربن فعال نمونه A و B و مدل فرن‌دلیچ برای کربن فعال نوع C و D است [۷].

حیدر محمد عبدالحمید^۲ در سال ۲۰۰۸، مقایسه‌ای بین همدماهای دوبینین-رادوشکویچ و تمکین برای جذب سطحی جیوه روی کربن فعال انجام داد. وی برای یافتن بهترین همدما، از تابع خطای هیبرید بهره گرفت. نتایج نشان دادند که مدل دوبینین-رادوشکویچ ($R^2 = 0.9928$) نسبت به مدل تمکین ($R^2 = 0.942$) با داده‌های تجربی برازش بهتری دارد [۹].

سابرامانیام^۳ و همکاران، در سال ۲۰۰۹، جذب سطحی فنل از محلول‌های آبی را با بهره‌گیری از خاک بررسی کردند. این تحقیق، به منظور مقایسه روش‌های خطی و ناخطی برازش، به منظور یافتن ضرایب همدماها و سازگاری آن‌ها با داده‌های تجربی انجام شده بود. به این منظور، ۶ همدمای خطی شامل ۴ عبارت خطی لانگمویر، فرن‌دلیچ و ردلیچ-پترسون و همدماهای ناخطی آن‌ها با هم مقایسه شدند. بنابر نتایج به دست آمده، عبارت ناخطی ردلیچ-پترسون، بهترین مدل سازگار با داده‌ها به‌شمار می‌آید [۱۰]. ویمین وو^۴ و همکاران در سال ۲۰۰۹، جذب سطحی کادمیم از محلول‌های آبی را با بهره‌گیری از آهن-مونت‌موریلونیت^۵ بررسی کردند. به منظور تحلیل داده‌های تعادلی جذب، از همدماهای لانگمویر، فرن‌دلیچ، ردلیچ-پترسون و کوبله کوریگان بهره گرفته شد. نتایج به دست آمده نشان داد که ردلیچ-پترسون و کوبله کوریگان بهترین مدل‌های سازگار با داده‌ها هستند [۱۱].

مهدی وادی^۶ و همکاران در سال ۲۰۱۰، جذب سطحی برخی آمینو

7. Harkins-Jura
8. Zaman Shamohammadi Heidari
9. Prasad
10. Dada
11. Jingjing Pei
12. Dawodu
13. NSU Clay

1. Bo Guo
2. Hayder Mohammed Abdul-Hameed
3. Subramanyam
4. Weimin Wu
5. Fe-Montmorillonite
6. Mehdi Vadi

۲- معادله‌ای جدید به منظور پیش‌بینی میزان جذب

معادله ارائه شده در این تحقیق از این قرار است:

$$q_e = q_s \frac{C_e^m}{(1 + K C_e^m)^t} \quad (1)$$

معادله (۱)، یک معادله ۵ پارامتری است که با تغییر مقادیر q_s ، m ، K ، n و t معادلات مربوط به سایر همدمها به دست خواهد آمد. هدف از ارائه مدل حاضر، تجمیع همدمهای دو و سه پارامتری لانگمویر، فرنلدیچ، هیل، ردلیچ-پترسون، سیپس، تات، کوبله-کورینگان، خان و رادکه-پرازنیتز در قالب یک معادله است که با هدف صرفه‌جویی در وقت پژوهشگران، تنها با تغییر مقادیر پارامترهای مدل، می‌توان به صورت هم‌زمان به معادلات مربوط به همدمهای بالا دسترسی پیدا کرد. کاهش تعداد پارامترهای این مدل، تعداد همدمهای کمتری را پوشش خواهد داد و در نهایت با افزایش آن تا حداکثر ۵ پارامتر، می‌توان به صورت هم‌زمان به معادلات مربوط به همدمهایی با عبارت ناخطی مشابه دست یافت. مقادیر مختلف پارامترهای معادله جدید در جدول (۲) درج شده‌اند.

عنوان جاذبی ارزان قیمت در مقایسه با سایر جاذب‌ها بود. داده‌های تعادلی جذب سطحی را با همدمهای لانگمویر، فرنلدیچ، دوینین - رادوشکویچ، ردلیچ - پترسون و اسکاچارد^۱ تحلیل کردند. با به دست آوردن مقادیر ضریب همبستگی همدمهای یادشده در بالا، ردلیچ - پترسون ($R^2 = 0.9842$) به عنوان بهترین همدم برگزیده شد [۱۷].

به دلیل برتری عبارت ناخطی همدمها نسبت به عبارت خطی آنها [۱۸]، در این مطالعه، با بررسی همدمهای جذب، معادله جدیدی ارائه شده است که از میان همدمهای مندرج در جدول (۱)، عبارت ناخطی همدمهای لانگمویر، فرنلدیچ، هیل، ردلیچ - پترسون، سیپس، تات، کوبله-کورینگان، خان و رادکه-پرازنیتز را پوشش می‌دهد. همچنین، مقایسه‌ای بین مقادیر ناشی از برازش معادله یادشده در بالا با مقادیر مربوط به سایر همدمها، به کمک نرم‌افزار متلب صورت گرفته است.

جدول ۲. مقادیر مختلف پارامترهای معادله جدید.

t	n	K	m	q_s	
۰	دلخواه	دلخواه	۰	q_s	بیشینه ظرفیت جذب
۰	دلخواه	دلخواه	۱	K	هنری ^۲
۱	۱	b	۱	$Q_0 b$	لانگمویر
۰	دلخواه	دلخواه	$\frac{1}{n}$	K_f	فرنلدیچ
۱	n_H	$\frac{1}{K_D}$	n_H	$\frac{q_{SH}}{K_D}$	هیل
۱	g	a_R	۱	K_R	ردلیچ - پترسون
۱	β_s	a_s	β_s	K_s	سیپس
$\frac{1}{t}$	۱	$\frac{1}{a_T}$	۱	$\frac{K_T}{a_T}$	تات
۱	n	B	n	A	کوبله-کورینگان
a_K	۱	b_K	۱	$q_s b_K$	خان
۱	$\beta_R - 1$	$\frac{r_R}{a_{RP}}$	β_R	r_R	رادکه - پرازنیتز

1. Scatchard
2. Henry

۲-۱-۲ توابع تحلیل خطا

در این تحقیق، به منظور بررسی داده‌های تعادلی جذب سطحی، از دو تابع تحلیل خطا بهره گرفته شد که، به ترتیب، عبارتند از:

۲-۱-۱ مجموع مربعات خطا (SSE)

$$SSE = \sum_{i=1}^n (Q_{calc} - Q_{meas})^2 \quad (2)$$

که در آن Q_{meas} غلظت یونی اندازه‌گیری شده و Q_{calc} غلظت یونی بدست آمده از مدل سینتیکی‌اند [۱۹].

۲-۱-۲ ضریب همبستگی (R^2)

$$R^2 = \frac{(Q_{meas} - \bar{Q}_{calc})^2}{\sum_{i=1}^n (Q_{meas} - \bar{Q}_{calc})^2 + (Q_{meas} - Q_{calc})^2} \quad (3)$$

که در آن \bar{Q}_{calc} میانگین Q_{calc} است [۱۹].

۳- نتایج و بحث

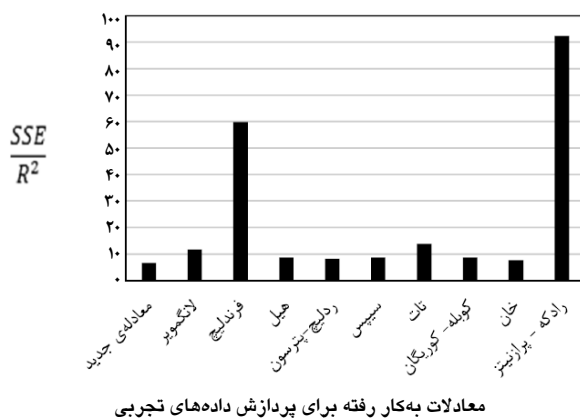
به‌طور کلی، هر چه تعداد پارامترهای تنظیم‌کننده یک معادله بیشتر باشد، نتایج ناشی از برازش داده‌های تجربی با این معادله بهتر خواهد بود. بر این اساس، انتظار می‌رود که معادله ۵ پارامتری پیشنهاد شده، نسبت به سایر مدل‌ها برازش بهتری با داده‌های تجربی داشته باشد.

مقادیر مجموع مربعات خطا و ضریب همبستگی با بهره‌گیری از برازش داده‌های آزمایشگاهی گوناگون، برای معادله جدید، به کمک نرم‌افزارهای تحلیل عددی محاسبه و با مقادیر مربوط به عبارت ناخطی سایر همدمها در شکل‌های (۱) تا (۵) مقایسه شده است. الگوریتم‌ها برای هر مدل در نرم‌افزار متلب چنان برگزیده شدند که بالاترین ضریب همبستگی و کمینه مجموع مربع خطا را داشته باشد. به بیان دیگر، معادله‌ای که کمترین مقدار نسبت $\frac{SSE}{R^2}$ را داشته باشد، با داده‌های تجربی تطبیق بهتری خواهد داشت.

نتایج برازش داده‌های آزمایشگاهی مربوط به جذب آنیلین در شکل (۱)، نشان می‌دهد که بهترین معادله منطبق با داده‌ها که مقدار $\frac{SSE}{R^2}$ کمتری داشته باشد، همین معادله جدید، ($\frac{SSE}{R^2} = 6.678$)،

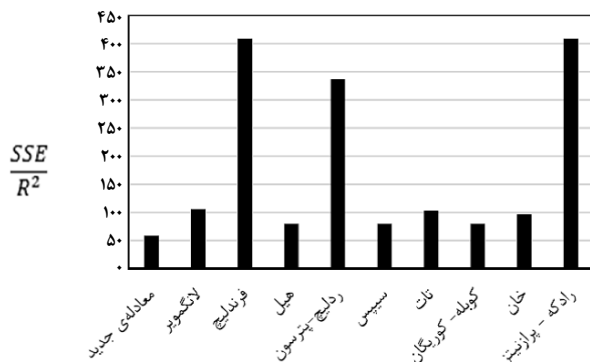
است. در مورد جذب فنل، شکل (۲)، نیز معادله جدید با داده‌های تجربی تطبیق بهتری دارد ($\frac{SSE}{R^2} = 59.003$). در جذب اتیل بنزن، شکل (۳)، دقیق‌ترین مدل رادکه-پرازنیتز است ($\frac{SSE}{R^2} = 6.267E - 07$) و معادله جدید در جایگاه دوم قرار می‌گیرد ($\frac{SSE}{R^2} = 6.320E - 07$). در جذب متیلن آبی ($\frac{SSE}{R^2} = 0.023$) و جذب کادمیم ($\frac{SSE}{R^2} = 8.871$) نیز معادله جدید نسبت به سایر مدل‌ها در

برازش با داده‌های تجربی از دقت زیادی برخوردار بوده است. با توجه به نتایج به‌دست آمده از برازش مدل با نرم‌افزار، می‌توان دقت بالای مدل نسبت به سایر همدمها، را از جمله مزایای آن به‌شمار آورد. افزایش تعداد پارامترها در دستیابی به این نتیجه بی‌تأثیر نبوده است اما این نکته را نیز باید در نظر گرفت که افزودن پارامترهای بیشتر به یک مدل، سبب برازش دشوارتر آن با داده‌های تجربی خواهد شد.



معادلات به‌کار رفته برای پردازش داده‌های تجربی

شکل ۱. مقایسه معادله جدید با سایر مدل‌ها با بهره‌گیری از داده‌های مربوط به جذب آنیلین [۲۰].



معادلات به‌کار رفته برای برازش داده‌های تجربی

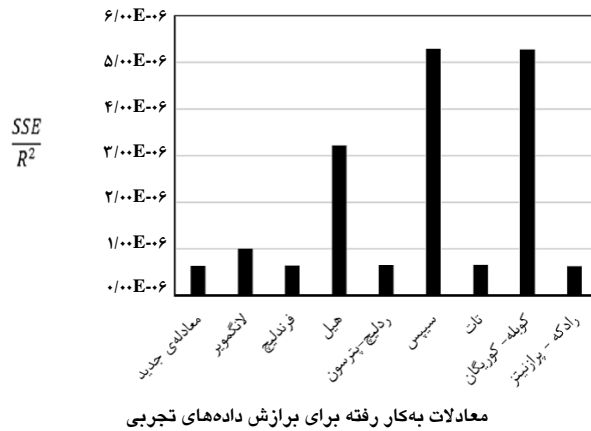
شکل ۲. مقایسه معادله جدید با سایر مدل‌ها با بهره‌گیری از داده‌های مربوط به جذب فنل [۲۰].

۴- نتیجه‌گیری کلی

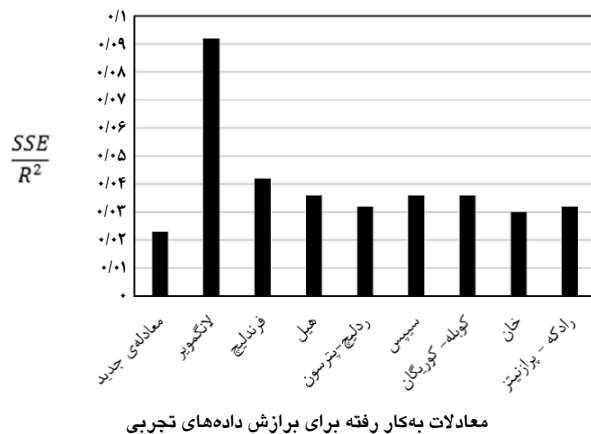
با بررسی همدماهای جذب سطحی، معادله‌ای ۵ پارامتری ارائه شد که عبارت ناخطی ۹ همدمای لانگمویر، فرندلیچ، هیل، ردلیچ-پترسون، سیس، تات، کوبله-کورگان، خان و رادکه-پرازنیتز را بیان کرد. به‌طور کلی، با افزایش تعداد پارامترهای یک معادله، نتایج حاصل از برازش آن با داده‌های تجربی بهتر خواهد شد. بر این اساس، معادله پیشنهاد شده نسبت به سایر مدل‌ها با داده‌های تجربی تطبیق بهتری داشته است؛ در صورتی که در مورد مدل‌های دو پارامتری لانگمویر و فرندلیچ نسبت به مدل‌های سه پارامتری تات و رادکه-پرازنیتز در جذب آنیلین، ردلیچ-پترسون و رادکه-پرازنیتز در جذب فنل، ردلیچ-پترسون و هیل در جذب اتیل بنزن و تات در جذب متیلن آبی، عکس این مطلب صادق است. در برازش یک معادله با داده‌های تجربی، هرچه نسبت مجموع مربعات خطا به ضریب همبستگی کمتر باشد، تطبیق بهتری انجام می‌پذیرد. بر این اساس، ضرایب همبستگی و مجموع مربعات خطای به‌دست آمده از نرم‌افزار متلب، در مورد جذب آنیلین $(\frac{SSE}{R^2} = 6.678)$ ، جذب فنل $(\frac{SSE}{R^2} = 59.003)$ ، جذب متیلن آبی $(\frac{SSE}{R^2} = 0.023)$ و جذب کادمیوم $(\frac{SSE}{R^2} = 8.871)$ دلالت بر دقت بالای معادله جدید نسبت به سایر همدمها دارد.

مراجع

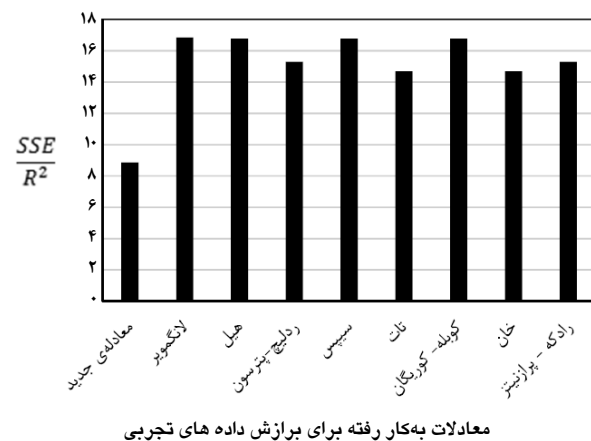
- [1] Foo, K. Y., Hameed, B. H., "Insights into the modeling of adsorption isotherm systems", Chemical Engineering Journal, Vol. 156, pp. 2-10, (2010).
- [2] Rao, K. S., Mohapatra, M., Anand, M., Venkateswarlu, P., "Review on cadmium removal from aqueous solutions", International Journal of Engineering Science and Technology, Vol. 2, pp. 81- 103, (2010).
- [3] Al-Anber, M. A., "Thermodynamics approach in the adsorption of heavy metals", Industrial Inorganic Chemistry, Department of Chemical Science, Faculty of Science Mu'tah University, P.O. Jordan, pp.737-765, (2011).
- [4] Ho, Y. S., Porter, J. F., McKay, G., "Equilibrium isotherm studies for the sorption of divalent metal ions on to peat: copper, nickel and lead single component systems", Water, Air, and Soil Pollution, Vol. 141, pp. 1-33, (2002).
- [5] Oremusová, J., "Adsorption", Department of Physical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Comenius University, Bratislava, pp.1-5, (2007).
- [6] Atkins, P. W., "Derivation of the BET and langmuir isotherms", Physical Chemistry 2nd edition, San Francisco: W. H. Free-man and Company, pp.1-9, (2011).



شکل ۳. مقایسه معادله جدید با سایر مدل‌ها با بهره‌گیری از داده‌های مربوط به جذب اتیل بنزن [۲۱].



شکل ۴. مقایسه معادله جدید با سایر مدل‌ها با بهره‌گیری از داده‌های مربوط به جذب متیلن آبی [۲۲].



شکل ۵. مقایسه معادله جدید با سایر مدل‌ها با بهره‌گیری از داده‌های مربوط به جذب کادمیوم [۲۳].

- [7] Mane, V. S., Deo Mall, I., Chandra Srivastava, V., "Kinetic and equilibrium isotherm studies for the adsorptive removal of Brilliant Green dye from aqueous solution by rice husk ash", *Journal of Environmental Management*, Vol. 84, pp. 390-400, (2007).
- [8] Guo, B., Chang, L., Xie, K., "Adsorption of carbon dioxide on activated carbon", *Journal of Natural Gas Chemistry*, Vol. 15, pp. 223-229, (2006).
- [9] Abdul-Hameed, H. M., "Comparison study between dubinin-redushkevich and temkin model for adsorption of mercury on to activated carbon", *Journal of Engineering*, Vol. 14, pp. 1-6, (2008).
- [10] Subramanyam B., Das, A., "Linearized and non-linearized isotherm models comparative study on adsorption of aqueous phenol solution in soil", *International Journal of Environment, Science and Technology*, Vol. 6, pp. 633-640, (2009).
- [11] Wu, P., Wu, W., Li, S., Xing, N., Zhu, N., Li, P., "Removal of Cd²⁺ from aqueous solution by adsorption using Fe-montmorillonite", *Journal of Hazardous Materials*, Vol. 169, pp. 824-30, (2009).
- [12] Vadi, M., Abbasi, M., Zakeri, M., Yazdi, B. J., "Application of the Freundlich, langmuir, temkin and harkins-jura adsorption isotherms for some amino acids and amino acids complexation with manganese ion(II) on carbon nanotube", *Journal of Physical and Theoretical Chemistry*, Vol. 7, pp. 95-104, (2010).
- [13] Heidari, Z. S., "Lead removal from aqueous solutions using low-cost adsorbents (in persian)", *Journal of Water and Waste Water*, Vol. 3, pp. 45-50, (2008).
- [14] Gulipalli, C. S., Prasad, B., Wasewar, K. L., "Batch study, equilibrium and kinetics of adsorption of selenium using rice husk ash (RHA)", *Journal of Engineering Science and Technology* Vol. 6, pp. 586-605, (2011).
- [15] Dada, A. O., Olalekan, A. P., Olatunya, A. M., Dada, O., "Langmuir, freundlich, temkin and dubinin-radushkevich isotherms studies of equilibrium sorption of zn²⁺ unto phosphoric acid modified rice husk", *Journal of Applied Chemistry*, Vol. 3, pp. 38-45, (2012).
- [16] Pei, J., Zhang, J. S., "Determination of adsorption isotherm and diffusion coefficient of toluene on activated carbon at low concentrations", *Building and Environment*, Vol. 48, pp. 66-76, (2012).
- [17] Dawodu, F. A., Akpomic, G. K., Abuh, M. A., "Equilibrium isotherm studies on the batch sorption of copper (ii) ions from aqueous solution on to "NSU clay"", *International Journal of Scientific & Engineering Research*, Vol. 3, pp. 1-7, (2012).
- [18] Kumar, K. V., Sivanesan, S., "Isotherm parameters for basic dyes onto activated carbon: comparison of linear and non-linear method", *Journal of Hazardous Materials*, Vol. 129, pp. 147-50, (2006).
- [19] Rostamian, R., Najafi, M., Rafati. A. A., "Synthesis and characterization of thiol-functionalized silica nano hollow sphere as a novel adsorbent for removal of poisonous heavy metal ions from water: Kinetics, isotherms and error analysis", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 171, pp. 1004- 1011, (2011).
- [20] Vîjan, L. E., Neagu, M., "Adsorption isotherms of phenol and aniline on activated carbon", *Revue Roumaine de Chimie*, Vol. 57, pp. 85-93, (2012).
- [21] Athappan, A., "Adsorption curve fits for landfill vocs on bituminous coal based and coconut shell based activated carbon", *Master of Science In Civil Engineering*, The University of Texas at Arlington, pp.1-127, (2008).
- [22] Itodo, A. U., Itodo, H. U., Gafar, M. K., "Estimation of specific surface area using langmuir isotherm method", *Journal of applied science and environmental management*, Vol. 14, pp. 141-145, (2010).
- [23] Jain, C. K., Ali, I., "Adsorption of cadmium on bed sediment", *National Institute of Hydrology, Jal Vigyan bhawan, Roorkee-247 667(UP India)*, pp.1-41, (1998).