

مطالعه و بررسی جذب تعادلی گازها در جاذب‌های جامد

ترانه جعفری بهبهانی^{۱*}، احمد سعیدی مهر^۲

۱. عضو هیئت علمی (استادیار) پژوهشگاه صنعت نفت، پژوهشکده توسعه فناوری‌های پالایش و فراورش نفت، تهران، استان

تهران، ایران، صندوق پستی ۱۳۷-۱۴۶۶۵

۲. دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران

دریافت: ۹۲/۸/۱۰ پذیرش: ۹۲/۱۲/۲۰

چکیده

جذب گازها بر روی جاذب‌های جامد یکی از فرایندهای مهم در صنایع گاز و همچنین در تصفیه پساب‌های صنعتی است. در این مقاله، مدل‌سازی فرایند جذب گازها در جاذب‌های جامد به منظور بررسی رفتار سیستم جذب و همچنین پیش‌بینی میزان جذب مورد بررسی قرار گرفته است. در این پژوهش، پس از معرفی کلیه مدل‌های دو و سه پارامتری جذب تعادلی گاز بر روی جامدات، مدل‌های لانگمویر، فروندلیچ، تمکین و ردلیش-پترسون انتخاب و پس از فرمولاسیون ریاضی و تنظیم پارامترهای هر مدل، نتایج تجربی با استفاده از مدل‌های فوق‌الذکر پیش‌بینی شده است. به منظور بررسی عملکرد هر مدل، انحراف نسبت به داده‌های آزمایشگاهی برای هر مدل محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد که مدل‌های جذب فروندلیچ و ردلیش-پترسون دارای عملکرد بهتری نسبت به سایر مدل‌های مورد مطالعه در فرایند جذب گاز هستند و دارای انحراف کم‌تری نسبت به نتایج آزمایشگاهی هستند.

کلمات کلیدی: جذب تعادلی گاز، ایزوترم، جاذب

مقدمه

تعادل پایدار، که در آن آهنگ جذب و همچنین دفع با هم برابر هستند، تعریف می‌شوند. در مدل‌سازی تعادلی جذب پیش‌بینی پارامترهای جذب و همچنین مقایسه کمی رفتار جاذب سطحی برای سامانه‌های مختلف و شرایط مختلف آزمایشگاهی مدنظر است؛ به طوری که باید کمترین خطای ممکن به وجود آید [۹-۱۱]. روش حداقل مجذورات خطی به طور گسترده‌ای برای تعیین پارامترهای ایزوترم و بهترین مدل مناسب استفاده می‌شود که در آن ضریب همبستگی رگرسیون نزدیک به یک

فرایند جذب گاز بر روی بس‌ترهای جامد یکی از مهم‌ترین فرایندهای صنعتی در صنایع نفت و گاز است. از جمله کاربردهای این فرایند مهم می‌توان به شیرین‌سازی و نم‌زدایی گاز طبیعی و تصفیه فاضلاب‌های صنعتی اشاره کرد. در حال حاضر، پژوهش‌های زیادی از جمله جذب در فرایندهای غشایی، واکنش‌های شیمیایی، فیلتراسیون و... در این زمینه انجام شده است [۳-۸]. تعادل جذب سطحی به عنوان حالت

*jafarit@ripi.ir

است [۱۲]. مدل‌های جذب هم‌دما به دو گروه دو پارامتری و سه پارامتری تقسیم می‌شوند.

هم‌دماهای دو پارامتری

مدل هم‌دمای لانگمویر^۱: مدل هم‌دمای جذبی لانگمویر در اصل برای توصیف جذب فاز گاز در کربن فعال توسعه یافته است که برای تعیین عملکرد جاذب‌های مختلف مورد استفاده قرار می‌گیرد.

در این مدل تجربی، فرض بر جذب سطحی تک لایه‌ای (یک مولکول در ضخامت در تعداد مکان‌های متمرکز محدود «ثابت» که مشابه و معادل هستند) است؛ به طوری که هیچ تعامل جانبی و ممانعت فضایی بین مولکول‌های جذب‌شده، حتی در مکان‌های مجاور هم، وجود ندارد. در مدل ریاضی آن، خطوط هم‌دمای لانگمویر به جذب همگن اشاره می‌کند که هر مولکول دارای آنتالپی و انرژی فعال‌سازی جذب سطحی ثابت بوده است [۱] و هیچ گریزی از ماده جذب‌شده در صفحه سطح وجود ندارد.

به صورت گرافیکی، این مدل را یک صفحه مشخص می‌کند که دارای نقطه اشباع تعادل است که در زمان اشغال یک مولکول در یک مکان جذب بیشتری رخ نمی‌دهد. علاوه بر این، تئوری لانگمویر در واقع به کاهش سریع نیروهای جاذبه مولکولی با افزایش فاصله وابسته است [۲]:

$$q_e = \frac{Q_o b C_e}{1 + b C_e} \quad (1)$$

مدل هم‌دمای فروندلیچ^۲: مدل هم‌دمای فروندلیچ اولین رابطه شناخته‌شده است که جذب غیرایده‌آل و برگشت‌پذیر را شرح می‌دهد و محدود به شکل تک‌لایه نیست. این مدل تجربی را می‌توان به جذب چندلایه‌ای با توزیع غیر یکنواخت جذب گرما و کشش در سرتاسر سطح ناهمگن اعمال کرد.

در حال حاضر، هم‌دمای فروندلیچ به طور گسترده در سامانه‌های ناهمگن، به ویژه برای ترکیبات آلی یا اجزائی با فعل و انفعال بالا در کربن فعال‌شده و صافی‌های مولکولی، اعمال

شده است. محدوده شیب بین صفر و یک در واقع اندازه شدت جذب یا ناهمگنی سطح است. در حالی که مقدار زیر یک (۱) به فرایند جذب شیمیایی دلالت می‌کند که در آن $1/n$ بالاتر از یک (۱) نشان‌دهنده جذب تعادلی است [۳].

$$q_e = k_F C_e^n \quad (2)$$

مدل هم‌دمای دوبینین-رادوشکویچ^۳: مدل هم‌دمای دوبینین-رادوشکویچ یک مدل تجربی است که در ابتدا برای جذب بخارات خطرناک بر روی جامدات ارائه شده بود و بر مکانیسم جذب با توزیع انرژی گاوسی بر روی یک سطح ناهمگن دلالت دارد. این مدل اغلب در محدوده متوسط غلظت به خوبی رفتار سامانه جذب را پیش بینی می‌کند، ولی نمی‌تواند قانون هنری را در فشار پایین پیش‌بینی کند.

$$q_e = (q_s) \exp(-k_{ad} \varepsilon^2) \quad (3)$$

این مدل معمولاً برای تشخیص جذب فیزیکی و شیمیایی یون‌های فلزی با متوسط انرژی آزاد E در هر مولکول ماده جذب‌شده استفاده می‌شود [۴]:

$$E = \left[\frac{1}{\sqrt{2B_{DR}}} \right] \quad (4)$$

که در آن B_{DR} به عنوان ثابت هم‌دمایی نامیده می‌شود.

$$\varepsilon = RT \ln \left[1 + \frac{1}{C_e} \right] \quad (5)$$

و در آن R و T و C_e به ترتیب نشان‌دهنده ثابت گاز، دمای مطلق و غلظت تعادلی ماده جذب‌شده است. یکی از ویژگی‌های منحصر به فرد مدل هم‌دمای دوبینین-رادوشکویچ وابستگی حرارتی آن است که وقتی داده‌های جذب در درجه حرارت‌های مختلف به صورت یک تابع لگاریتمی از مقدار مجذور انرژی پتانسیل در مقابل جذب شده رسم شود، تمام داده‌های مناسب بر روی منحنی مشابه‌ای قرار خواهند گرفت که منحنی مشخصه نامیده می‌شود.

مدل هم‌دمای تمکین: مدل هم‌دمای تمکین اولین مدلی

1. Langmuir
2. Freundlich

3. Dubinin -Radushkevich

مکان‌های پیوند مختلف بر روی مولکول‌های درشت مشابه قرار گیرد [۶].

$$q_e = \frac{q_{sH} C_e^{nH}}{K_D + C_e^{nH}} \quad (9)$$

همدمای سه پارامتری

مدل همدمای ردلیش-پترسون: مدل ردلیش-پترسون یک مدل همدمای ترکیبی شامل هر دو مدل همدمای لانگمویر و فرندلیچ است که سه پارامتر در یک معادله تجربی وجود دارد. در این مدل یک وابستگی خطی به غلظت در صورت کسر و یک تابع نمایی در مخرج کسر برای نشان دادن تعادل جذبی در سراسر محدوده گسترده غلظت وجود دارد که می‌تواند در سامانه‌های همگن یا ناهمگن با توجه به تطبیق پذیری آن اعمال شود. به صورت حدی، این مدل به مدل همدمای فرندلیچ در غلظت بالا نزدیک می‌شود (نمای β به سمت صفر میل کند) و مطابق با حد غلظت پایین در شرایط لانگمویر ایده‌آل است (مقدار β نزدیک به یک) [۷].

$$q_e = \frac{k_R C_e}{1 + a_R C_e^g} \quad (10)$$

مدل همدمای سیپس^۴: مدل همدمای سیپس یک فرم ترکیبی از اظهارات فرندلیچ و لانگمویر است که برای پیش‌بینی سامانه‌های جذب ناهمگن استنباط شده است و محدودیت افزایش غلظت ماده جذب‌شده مربوط به مدل همدمای فرندلیچ را حل کرده است. در غلظت پایین ماده جذب‌شده آن تبدیل به مدل همدمای فرندلیچ شده، در حالی که در غلظت‌های بالا آن ظرفیت جذب تک‌لایه‌ای مشخصه همدمای لانگمویر را پیش‌بینی می‌کند. به عنوان یک قاعده کلی، پارامترهای معادله عمدتاً توسط شرایط عملیاتی همچون pH، دما و غلظت تحت پوشش قرار می‌گیرند [۸].

$$q_e = \frac{K_S C_e^{\beta_S}}{1 + a_S C_e^{\beta_S}} \quad (11)$$

مدل همدمای توت^۵: مدل همدمای توت یکی دیگر از معادله‌های تجربی توسعه‌یافته برای بهبود همدمای لانگمویر (داده‌های تجربی) و مفید بودن در توصیف سامانه‌های جذب

است که جذب هیدروژن بر روی الکتروده‌های پلاتین را در محلول‌های اسیدی توصیف می‌کند. این مدل شامل یک عامل است که به‌صراحت دلیل بر هم کنش جاذب و ماده جذب‌شده را توضیح می‌دهد. با نادیده گرفتن مقدار بسیار کم و مقدار زیاد غلظت، این مدل فرض می‌کند که جذب (تابعی از دما) به صورت لگاریتمی با پوشش به صورت خطی کاهش می‌یابد. همان‌طور در معادله اعمال شده، در حقیقت مشتق آن به وسیله یک توزیع یکنواخت از انرژی‌های پیوند (تا حداکثر انرژی پیوند) مشخص می‌شود. معادله تمکین برای پیش‌بینی تعادل فاز گاز بسیار مناسب است (زمانی که سازمان‌دهی در یک ساختار بسته‌بندی شده محکم با جهت‌گیری یکسان ضروری نیست). سامانه‌های جذب سطحی کمپلکس معکوس شامل همدمای جذبی فاز مایع هستند که معمولاً برای نشان دادن مناسب نیستند [۵].

$$q_e = \frac{RT}{b_T} \ln A_T C_e \quad (6)$$

مدل همدمای فلوری - هاگینز^۱: مدل همدمای فلوری - هاگینز که گاهی اوقات درجه مشخصه‌های پوشش سطح ماده جذب‌شده را بر روی جاذب نشان می‌دهد.

$$\frac{\theta}{C_0} = K_{FH} (1 - \theta)^{n_{FH}} \quad (7)$$

در حقیقت می‌تواند امکان و طبیعت خود به خود فرایند جذب را بیان کند. در این مدل، θ درجه پوشش سطح است که در آن K_{FH} و n_{FH} نشانه ثابت تعادل آن و نماینده مدل هستند. ثابت تعادل آن، K_{FH} که برای محاسبه انرژی آزاد گیبس^۲ خود به خودی استفاده می‌شود، به معادله زیر ارتباط دارد:

$$\Delta G^\circ = -RT \ln(K_{FH}) \quad (8)$$

مدل همدمای هیل^۳: در معادله هیل پیوند اجزای مختلف بر روی جزء مورد عمل بیان می‌شود. در این مدل فرض بر این است که جذب یک پدیده تعادلی با توانایی پیوند لیگاند در یک مکان بر روی درشت مولکول بوده که ممکن است تحت تأثیر

1. Flory-Huggins
2. Gibbs Energy
3. Hill

4. Sips
5. Toth

جذب تعادلی (mg/g) هستند. هنگامی که C_{BET} و (C_s/C_s) بسیار بزرگتر از ۱ باشد، معادله به صورت زیر ساده می‌شود:

$$q_e = \frac{q_s}{1-(C_e/C_s)} \quad (17)$$

مدل هم‌دما (FHH)^۵: مدل دیگر جذب سطحی چندلایه‌ای به صورت زیر نوشته شود:

$$\ln\left(\frac{C_e}{C_s}\right) = -\frac{\alpha}{RT}\left(\frac{q_s}{q_e d}\right)^r \quad (18)$$

که در آن α ، d و r به ترتیب نشانه فاصله بین دو لایه (m)، ثابت هم‌دما ($Jm^4/mole$) و معکوس توان فاصله از سطح (حدوداً ۳) هستند. به همین نحو، مدل هم‌دما (MET)^۶ یک مدل جذب سطحی تفسیرشده از گنجاندن آثار تنش سطحی در هم‌دما BET هستند که به صورت زیر بیان می‌شود:

$$q_e = q_s \left(\frac{k}{\ln(C_s/C_e)}\right)^{1/3} \quad (19)$$

که در آن k ثابت هم‌دما هستند. هنگامی که C_s/C_e در حال نزدیک شدن به یک هستند، اصطلاح لگاریتمی می‌تواند به صورت زیر تقریب زده شود:

$$q_e = q_s \left(\frac{kC_e}{C_s - C_e}\right)^{1/3} \quad (20)$$

باید توجه داشت که مدل‌های (FHH) و (MET) برای فشارهای نسبی بالاتر از ۰/۸ و مدل (BET)^۷ برای فشار نسبی کم‌تر از ۰/۳۵ مناسب هستند [۱۲].

در جدول شماره (۱)، کلیه ایزوترم‌های مورد مطالعه خلاصه شده است.

روش تحقیق

مدل‌های مورد بررسی در این تحقیق شامل لانگمویر-فرندلیچ، ردلیش-پترسون و تمکین هستند که مشخصات مدل خطی و غیرخطی آن‌ها در جدول (۲) ارائه شده است.

ناهمگن است که هر دو مرز پایین و بالای غلظت را ادا می‌کند. پیش‌فرض رابطه آن در واقع توزیع انرژی نامتقارن گاوسی است که در آن بسیاری از مکان‌ها یک انرژی جذب پایین‌تر از پیک (حداکثر) یا مقدار متوسط دارند.

$$q_e = \frac{K_T C_e}{(a_T + C_e)^{1/t}} \quad (12)$$

مدل هم‌دما کوبل کوریگان^۱: این مدل یک معادله سه پارامتری است که هر دو مدل هم‌دما لانگمویر و فرندلیچ را شامل می‌شود. ثابت‌های هم‌دمایی، A ، B و n از طریق نمودار خطی و با استفاده از بهینه‌سازی آزمایش و خطا ارزیابی شده است [۹].

$$q_e = \frac{AC_e^n}{1+BC_e^n} \quad (13)$$

مدل هم‌دما خان^۲: مدل هم‌دما خان یک مدل تعمیم‌یافته پیشنهادی برای محلول‌های خالص است که b_k و a_k ثابت مدل هستند [۱۰].

$$q_e = \frac{q_s b_k K C_e}{(1 + b_k C_e)^{a_k}} \quad (14)$$

مدل هم‌دما رادک پرازنیتز^۳: توان مدل توسط β_R نشان داده می‌شود که a_R و r_R بیانگر ثابت‌های مدل هستند [۱۱].

$$q_e = \frac{a_{RP} r_R C_e^{\beta_R}}{a_{RP} + r_R C_e^{\beta_R} - 1} \quad (15)$$

مدل هم‌دما چندلایه^۴: مدل هم‌دما چندلایه یک معادله تئوری است که به طور گسترده در سامانه‌های تعادل گاز جامد استفاده می‌شود. این مدل برای استنتاج کردن سامانه‌های جذبی چندلایه‌ای با محدوده فشار نسبی بر حسب پوشش تک‌لایه‌ای توسعه یافته است.

$$q_e = \frac{q_s C_{BET} C_e}{(C_s - C_e)[1 + (C_{BET})(C_e/C_s)]} \quad (16)$$

که در آن C_s ، C_{BET} ، q_s و q_e به ترتیب هم‌دما جذب سطحی (L/mg)، غلظت اشباع تک‌لایه‌ای ماده جذب شده (mg/L)، ظرفیت اشباع هم‌دما نظری (mg/g) و ظرفیت

1. Koble-Corrigan

2. Khan

3. Radke Prausnitz

4. Brunauer-Emmett-Teller (PET)

5. Frenkel-Halsey-Hill

6. MacMillan-Teller

7. Brunauer-Emmett-Teller

نتایج و بحث

در طول چند دهه گذشته، رگرسیون خطی در حکم یک گزینه مهم در طراحی سامانه‌های جذب سطحی گسترش پیدا کرده است. در واقع، خطی‌سازی به عنوان یک گزینه مطمئن در این زمینه است که در بیش از ۹۵ درصد از سامانه‌های جذب اعمال می‌شود. نتایج مدل‌سازی در شکل‌های (۱ تا ۴) ارائه شده است.

همچنین، در این پژوهش پس از بررسی مدل‌های لانگمویر، فروندلیچ، تمکین و ردلیش-پترسون میزان انحراف هر مدل نسبت به نتایج آزمایشگاهی برای غلظت‌های مختلف محاسبه می‌شود که در جدول (۶) نشان داده شده است.

مدل لانگمویر با میزان انحراف $R^2 = 0/9167$ نامناسب‌ترین مدل است. در حالی که مدل تمکین با میزان انحراف $0/9952$ دارای عملکرد بهتری نسبت به مدل لانگمویر در جذب تعادلی گازست. مدل‌های فروندلیچ و ردلیش-پترسون با میزان انحراف یک مناسب‌ترین ایزوترم‌ها در فرایند جذب تعادلی گازها هستند. در مدل فروندلیچ مقدار جذب‌شده در واقع مجموع جذب در تمام مکان‌ها (با هر انرژی پیوند) است که مکان‌هایی با پیوند قوی‌تر در ابتدا اشغال می‌شوند و در نهایت انرژی جذب سطحی به صورت نمایی به محض اتمام فرایند جذب کاهش می‌یابد. مدل ردلیش-پترسون یک مدل ترکیبی از دو مدل لانگمویر و فروندلیچ است. این مدل یک وابستگی خطی به غلظت در صورت کسر و یک تابع نمایی در مخرج کسر برای نشان دادن تعادل جذبی در سراسر محدوده گسترده غلظت دارد که می‌تواند در سامانه‌های همگن یا ناهمگن با توجه به تطبیق‌پذیری آن اعمال شود. در صورت حدی، این مدل به ایزوترم فروندلیچ در غلظت بالا نزدیک می‌شود (در واقع g به سمت صفر میل می‌کند) و در حد غلظت پایین با شرایط ایزوترم لانگمویر ایده‌آل مطابقت دارد (مقدار g نزدیک به یک است). لازم به ذکر است که در شکل‌های رسم‌شده تمام مواردی که دارای شیب نزدیک به یک هستند، نسبت به سایر موارد که دارای شیب کم‌تری نسبت به حالات دیگر هستند، ارجحیت دارند.

مقادیر پارامترهای هر مدل در جدول (۷) ارائه شده است.

علت انتخاب این مدل‌ها عبارت‌اند از:

- مدل لانگمویر: قدیمی‌ترین و متداول‌ترین مدل در فرایند جذب است.
- مدل فروندلیچ: این مدل تجربی را می‌توان به جذب چندلایه‌ای، با توزیع غیریکنواخت جذب گرما و کشش در سرتاسر سطح ناهمگن اعمال کرد.
- مدل تمکین: این مدل شامل یک عامل است که به‌صراحت دلیل بر هم کنش جاذب و ماده جذب‌شده را توضیح می‌دهد.
- مدل ردلیش-پترسون: مدل ردلیش-پترسون یک مدل هم‌دمای ترکیبی شامل هر دو مدل هم‌دمای لانگمویر و فروندلیچ است که سه پارامتر در یک معادله تجربی وجود دارد (مدل سه پارامتری).
- داده‌های آزمایشگاهی مورد استفاده در این مدل‌سازی برای مدل‌های لانگمویر و فروندلیچ در جدول (۳) ارائه شده‌اند [۱۴]. داده‌های آزمایشگاهی تعادلی از یک سامانه میکرو بسته به دست آمده است. نمونه جاذب پس از توزین در ظرف مربوطه قرار می‌گیرد و سپس در شرایط خلأ قرار داده می‌شود. دقت این سامانه در حدود $8-10 \times \pm 2$ است. دو دستگاه مبدل فشار در محدوده‌های زیر مورد استفاده قرار گرفته است.
 - صفر تا $0/1$ MPa با دقت $5-10 \times \pm 2$
 - صفر تا 25 MPa با دقت $3-10 \times \pm 2/5$
- نرخ گرمایش برای رسیدن به دمای 593 K، 2 K/min با دقت $0/01$ K است.
- بدین ترتیب، ایزوترم‌ها در دمای مورد نظر اندازه‌گیری می‌شوند.
- لازم به ذکر است که در مدل فروندلیچ دو پارامتر n و K_f را نیز برای محاسبات باید لحاظ کرد که مقادیر آن‌ها به ترتیب برابر با $14/02$ (mg/g) و $0/0721$ است. داده‌های آزمایشگاهی بررسی شده برای مدل تمکین در دمای 1 ± 20 درجه سانتی‌گراد به دست آمده‌اند و در جدول (۴) قرار دارند [۱۵].
- همچنین داده‌های آزمایشگاهی برای محاسبات در ایزوترم ردلیش-پترسون در جدول (۵) قرار دارد.

جدول ۱: ایزوترم‌های مورد مطالعه [۲]

ایزوترم	فرم غیر خطی	فرم خطی	نمودار
لانگمویر (Langmuir)	$q_e = \frac{Q_0 b C_e}{1 + b C_e}$	$\frac{C_e}{q_e} = \frac{1}{b Q_0} + \frac{C_e}{Q_0}$ $\frac{1}{q_e} = \frac{1}{Q_0} + \frac{1}{b Q_0 C_e}$ $q_e = Q_0 - \frac{q_e}{b C_e}$ $\frac{q_e}{C_e} = b Q_0 - b q_e$	$\frac{C_e}{q_e}$ vs C_e $\frac{1}{q_e}$ vs $\frac{1}{C_e}$ q_e vs $\frac{q_e}{b C_e}$ $\frac{q_e}{C_e}$ vs q_e
فروندلیچ (Freundlich)	$q_e = K_F C_e^{1/n}$	$\log q_e = \log K_F + \frac{1}{n} \log C_e$	$\log q_e$ vs $\log C_e$
دوبینین-رادوشکویچ (Dubinin- Radushkevish)	$q_e = (q_s) \exp(-k_{ad} \varepsilon^2)$	$\ln(q_e) = \ln(q_s) - k_{ad} \varepsilon^2$	$\ln(q_e)$ vs ε^2
تمکین (Tempkin)	$q_e = \frac{RT}{b_T} \ln A_T C_e$	$q_e = \frac{RT}{b_T} \ln A_T + \left(\frac{RT}{b_T}\right) \ln C_e$	q_e vs $\ln C_e$
فلوری-هاگینز (Flory-Huggins)	$\frac{\theta}{C_0} = K_{FH} (1 - \theta)^{n_{FH}}$	$\log\left(\frac{\theta}{C_0}\right) = \log(K_{FH}) + n_{FH} \log(1 - \theta)$	$\log\left(\frac{\theta}{C_0}\right)$ vs $\log(1 - \theta)$
هیل (Hill)	$q_e = \frac{q_{sH} C_e^{nH}}{K_D + C_e^{nH}}$	$\log\left(\frac{q_e}{q_{sH} - q_e}\right) = n_H \log(C_e) - \log(K_D)$	$\log\left(\frac{q_e}{q_{sH} - q_e}\right)$ vs $\log(C_e)$
ردلیش-پترسون (Redlich- peterson)	$q_e = \frac{K_R C_e}{1 + a_R C_e^g}$	$\ln\left(K_R \frac{C_e}{q_e} - 1\right) = g \ln(C_e) + \ln(a_R)$	$\ln\left(K_R \frac{C_e}{q_e} - 1\right)$ vs $\ln(C_e)$
سیپس (Sips)	$q_e = \frac{K_S C_e^{\beta_S}}{1 + a_S C_e^{\beta_S}}$	$\beta_S \ln(C_e) = -\ln\left(\frac{K_S}{q_e}\right) + \ln(a_S)$	$\ln\left(\frac{K_S}{q_e}\right)$ vs $\ln(C_e)$
توس (Toth)	$q_e = \frac{K_T C_e}{(a_T + C_e)^{1/t}}$	$\ln\left(\frac{q_e}{K_T}\right) = \ln(C_e) - \frac{1}{t} \ln(a_T + C_e)$	$\ln\left(\frac{q_e}{K_T}\right)$ vs $\ln(C_e)$
کوبل-کورینگان (Koble- Corrigan)	$q_e = \frac{A C_e^n}{1 + B C_e^n}$	$\frac{1}{q_e} = \frac{1}{A C_e^n} + \frac{B}{A}$	-
خان (Khan)	$q_e = \frac{q_s b_K C_e}{(1 + b_K C_e)^{a_K}}$	-	-
رادخ-پراسنیتز (Radke-Prausnits)	$q_e = \frac{a_{RP} r_R C_e^{\beta} R}{a_{RP} + r_R C_e^{\beta} R - 1}$	-	-
بت (BET)	$q_e = \frac{q_s C_{BET} C_e}{(C_s - C_e)[1 + (C_{BET} - 1)(C_e/C_s)]}$	$\frac{C_e}{q_e(C_s - C_e)} = \frac{1}{q_s C_{BET}} + \frac{(C_{BET} - 1) C_e}{q_s C_{BET} C_s}$	$\frac{C_e}{q_e(C_s - C_e)}$ vs $\frac{C_e}{C_s}$
اف اچ اچ (FHH)	$\ln\left(\frac{C_e}{C_s}\right) = -\frac{\alpha}{RT} \left(\frac{q_s}{q_e d}\right)^r$	-	-
مت (MET)	$q_e = q_s \left(\frac{k}{\ln(C_s/C_e)}\right)^{1/3}$	-	-

جدول ۲: ایزوترم‌های مورد استفاده

ایزوترم‌ها	مدل غیر خطی	مدل خطی
لانگمویر	$q_e = \frac{Q_0 b C_e}{1 + b C_e}$	$\frac{C_e}{q_e} = \frac{1}{b Q_0} + \frac{C_e}{Q_0}$
فروندلیچ	$q_e = k_F C_e^{\frac{1}{n}}$	$\log q_e = \log K_F + \frac{1}{n} \log C_e$
تمکین	$q_e = \frac{RT}{T} \ln A_T C_e$	$q_e = \frac{RT}{b_T} \ln A_T + \left(\frac{RT}{b_T}\right) \ln C_e$
ردلیش-پترسون	$q_e = \frac{k_R C_e}{1 + a_R C_e^g}$	$\ln\left(K_R \frac{C_e}{q_e} - 1\right) = g \ln(C_e) + \ln(a_R)$

جدول ۳: داده‌های آزمایشگاهی برای ایزوترم‌های لانگمویر و فروندلیچ

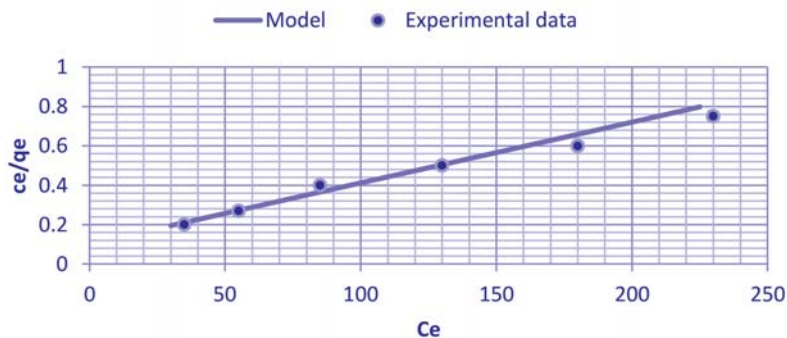
C_e	۳۰ - ۶۰ - ۹۰ - ۱۲۵ - ۱۷۵ - ۲۲۵ (mg/L)
b	۰/۰۳ (cm ³ /mg)
Q_0	۳۲۲/۶۲ (mg/g)

جدول ۴: داده‌های آزمایشگاهی برای محاسبات در ایزوترم تمکین

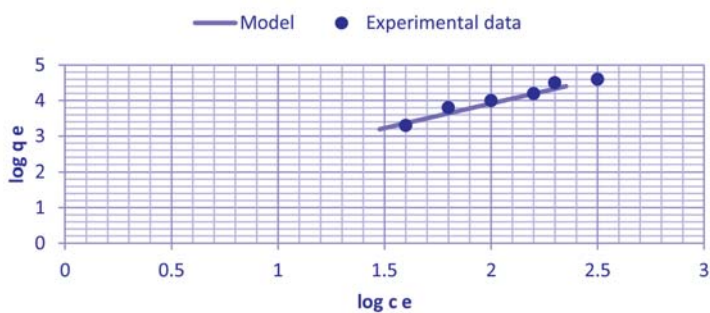
$\ln C_e$	۲-۴-۶-۸
A_T	۰/۰۷۰ $\left(\frac{L}{mg}\right)$
R	۸/۳۱۴ $\left(\frac{j}{mol.k}\right)$
b_T	۱/۹۶۱ $\left(\frac{kJ}{mol}\right)$

جدول ۵: داده‌های آزمایشگاهی برای محاسبات در ایزوترم ردلیش-پترسون

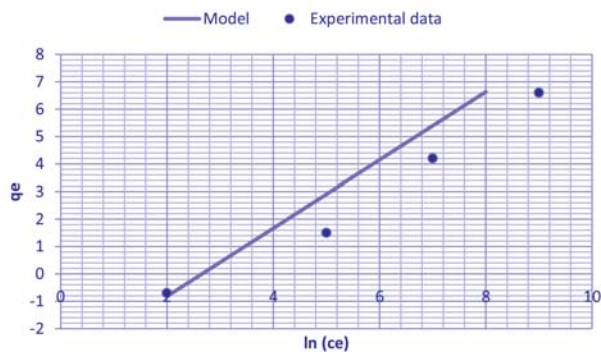
C_e^g	۵۰۰-۱۰۰۰-۱۵۰۰-۲۰۰۰-۲۵۰۰
K_R	۰/۰۴۳ (L/g)
g	۰/۶۷
a_R	۰/۰۶۴ (L/mmol)



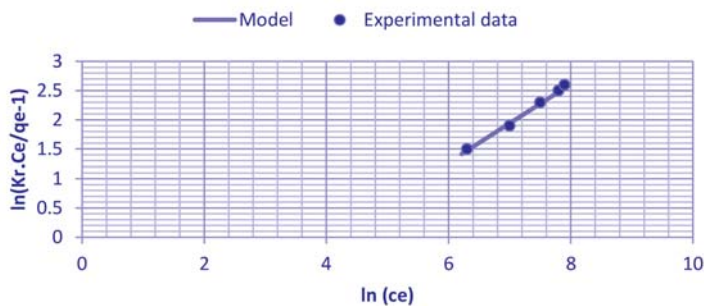
شکل ۱: نتایج مدل سازی با استفاده از مدل لانگمویر



شکل ۲: نتایج مدل سازی با استفاده از مدل فروندلیچ



شکل ۳: نتایج مدل سازی با استفاده از مدل تمکین



شکل ۴: نتایج مدل سازی با استفاده از مدل ردلیش-پترسون

جدول ۶: میزان انحراف مدل های مورد مطالعه

مدل ها	میزان انحراف مدل (R^2)
مدل لانگمویر	۰/۹۱۶۷
ایزوترم فروندلیچ	۱
ایزوترم تمکین	۰/۹۹۵۲
ایزوترم ردلیش-پترسون	۱

جدول ۷: مقادیر پارامترهای مدل های مورد مطالعه

مدل ها	پارامتر		
مدل لانگمویر	b		
	۰/۰۳		
ایزوترم فروندلیچ	K_F	n	
	۱۴/۰۲	۰/۰۷۲۱	
ایزوترم تمکین	A_T	b_T	
	۰/۰۷	۱/۹۶۱	
ایزوترم ردلیش-پترسون	K_R	g	a_R
	۰/۰۴۳	۰/۶۷	۰/۰۶۴

فهرست علائم و نشانه ها

d - فاصله بین لایه ها	a_K - توان مدل ایزوترم خان
ϵ - ثابت ایزوترم دوبینین - رادوشکویچ	a_R - ثابت ایزوترم ردلیش - پترسون ($\frac{L}{g}$)
E - انرژی آزاد ($\frac{kJ}{mol}$)	a_{RP} - ثابت ایزوترم رادخ-پراسنیتز
g - توان ایزوترم ردلیش-پترسون	a_S - ثابت ایزوترم سیپس ($\frac{L}{mg}$)
ΔG° - تغییرات انرژی گیبس ($\frac{kJ}{mol}$)	a_T - ثابت ایزوترم توس ($\frac{L}{mg}$)
k - ثابت ایزوترم مک میلان-تلا (MET)	A - ثابت ایزوترم کوبل-کورینگان ($L^n mg^{1-n}/g$)
K_{ad} - ثابت ایزوترم دوبینین - رادوشکویچ ($\frac{mol^2}{kJ^2}$)	A_T - ثابت تعادلی اتصال ایزوترم تمکین ($\frac{L}{g}$)
K_D - ثابت هیل	b - ثابت ایزوترم لانگمویر ($\frac{dm^3}{mg}$)
K_F - ثابت ایزوترم فروندلیچ (براساس ظرفیت جذب)	b_K - ثابت ایزوترم خان
$(\frac{dm^3}{g})^n, (\frac{mg}{g})$	b_T - ثابت ایزوترم تمکین
K_{FH} - ثابت تعادلی فلوری هاگینز ($\frac{L}{g}$)	B - ثابت ایزوترم کوبل-کورینگان ($\frac{L}{mg}$) ⁿ
K_L - ثابت ایزوترم لانگمویر ($\frac{L}{mg}$)	B_{DR} - ثابت ایزوترم دوبینین-رادوشکویچ
K_R - ثابت ایزوترم ردلیش-پترسون ($\frac{L}{g}$)	C_e - غلظت تعادلی
K_S - ثابت ایزوترم سیپس ($\frac{L}{g}$)	C_0 - غلظت اولیه جذب ($\frac{mg}{L}$)
K_T - ثابت ایزوترم توس ($\frac{mg}{g}$)	C_s - غلظت اشباع تک لایه جذب ($\frac{mg}{L}$)
n - شدت جذب	C_{BET} - ایزوترم جذب بت (BET) مربوط به انرژی تعاملی
n_{FH} - توان ایزوترم فلوری هاگینز	سطح ($\frac{L}{mg}$)
Hill cooperativity coefficient of the binding interaction - n_H	

R - ثابت جهانی گازها $(\frac{8.314j}{mol.K})$	p - تعداد پارامتر
R^2 - ضریب همبستگی	q_e - مقدار ماده جذب شده در حالت تعادلی $(\frac{mg}{g})$
R - ضریب جدایی	$q_{e,calc}$ - مقدار محاسبه غلظت جذب شده در تعادل $(\frac{mg}{g})$
t - ثابت ایزوترم توس	$q_{e,meas}$ - مقدار اندازه گیری غلظت جذب شده در تعادل $(\frac{mg}{g})$
T - دما (K)	q_s - ظرفیت اشباع ایزوترم نظری $(\frac{mg}{g})$
θ - درجه پوشش سطح	q_{sH} - حداکثر اشباع ایزوترم هیل $(\frac{mg}{L})$
a - ثابت ایزوترم فرنکلی-هالسی-هیل $(\frac{Jm^r}{mole})$ ، r نشان دهنده	Q_0 - حداکثر ظرفیت پوشش تک لایه $(\frac{mg}{g})$
فاصله قدرت معکوس از سطح	r - فاصله قدرت معکوس از سطح
β_R - توان ایزوترم مدل رادخ-پراسنیتز	r_R - ثابت ایزوترم مدل رادخ-پراسنیتز
β_S - توان ایزوترم مدل سیپس	

منابع

1. Foo, K.Y., Hameed, B.H., Utilization of biodiesel waste as a renewable resource for activated carbon: application to environmental problems, *Renew. Sust. Energy Rev.*, 13, 2009, pp. 2495–2504.
2. Foo, K.Y., Hameed, B.H., Insights into the modeling of adsorption isotherm systems, *Chemical Engineering Journal* 156, 2010, pp. 2–10.
3. Marti, N. A., Bouzas, A., Seco, J., Struvite precipitation assessment in anaerobic digestion processes, *Chem. Eng. J.*, 141, 2008, pp. 67–74.
4. Liang, Z., Wang, Y.X., Zhou, Y., Liu, H., Coagulation removal of melanoidins from biologically treated molasses wastewater using ferric chloride, *Chem. Eng. J.*, 152 (1), 2009, pp. 88–94.
5. Bürger, R. F., Concha, F.M. Tiller, Applications of the phenomenological theory to several published experimental cases of sedimentation processes, *Chem. Eng. J.*, 80 (1–3), 2000, pp. 105–117.
6. Macfarlane, A.L., Prestidge, R. M.M., Farid, J.J.J. Chen, Dissolved air flotation: a novel approach to recovery of organosolv lignin, *Chem. Eng. J.*, 148 (1), 2009, pp. 15–19.
7. Deuschle, T. U., Janoske, M. Piesche, A CFD-model describing filtration, regeneration and deposit rearrangement effects in gas filter systems, *Chem. Eng. J.*, 135 (1–2), 2008, pp. 49–55.
8. Langmuir, I., The constitution and fundamental properties of solids and liquids, *J. Am. Chem. Soc.*, 38 (11), 1916, pp. 2221–2295.
9. Srivastava, V.V., Swamy, M.M., Mall, I.D., Prasad, B., Mishra, I.M., Adsorptive removal of phenol by bagasse fly ash and activated carbon: equilibrium, kinetics and thermodynamics, *Colloids Surf. A*, 272, 2006, pp. 89–104.
10. Gimbert, F., Morin-Crini, N., Renault, F., Badot, P.M., Crini, G., Adsorption isotherm models for dye removal by cationized starch-based material in a single component system: error analysis, *J. Hazard. Mater.*, 157, 2008, pp. 34–46.
11. Krishna R., Adsorptive separation of CO₂/CH₄/CO gas mixtures at high pressure, *Microporous and Mesoporous Materials*, 156, 2012, pp. 217–223.
12. Wong, Y.C., Szeto, Y.S., Cheung, W.H., McKay, G., Adsorption of acid dyes on chitosan-equilibrium isotherm analyses, *Process Biochem.*, 39, 2004, pp. 693–702.
13. Tempkin, M.I., Pyzhev, V., Kinetics of ammonia synthesis on promoted iron catalyst, *Acta Phys. Chim. USSR*, 12, 1940, pp. 327–356.
14. Bakhtiar, K. H., Ahmad, Md. N. Afidah, A. R., Removal of 4-Chloro-2-Methoxyphenol from Aqueous Solution by Adsorption to Oil Palm Shell Activated Carbon Activated with K₂CO₃, *Journal of Physical Science*, 22, 2011, pp. 39–55.
15. Shahmohammadi-Kalalagh, Sh., Babazadeh1, H., Nazemi, A. H., Manshouri, M., Isotherm and Kinetic Studies on Adsorption of Pb, Zn and Cu by Kaolinite, *Caspian J. Env. Sci.*, 9, 2011, pp. 243–255.