

Investigation of the Adsorption Process of Reactive Blue 21 Dye on Activated Carbon Produced from Palm Tree Fibers

Elahe Dehghan Dehnavi^{1,2}, Shadi Mahmoudi^{1,2}, Seyedeh Mahtab Pormazar^{1,2}, Arash Dalvand^{1*}

1-Environmental Science and Technology Research Center, Department of Environmental Health Engineering, School of Public Health, Shahid Sadoughi University of Medical Sciences, P. O. Box: 887, Yazd, Iran

2- Student Research Committee, Shahid Sadoughi University of Medical Sciences, P. O. Box: 887, Yazd, Iran

ARTICLE INFO

Article history:

Received: 12-04-2025

Accepted: 16-06-2025

Available online: 19-07-2025

Print ISSN: 2251-7278

Online ISSN: 2383-2223

DOI: 10.30509/jscw.2025.167519.1229

Keywords:

Adsorption

Activated Carbon

Modeling

Reactive Blue dye

Palm fibers

Density functional theory

ABSTRACT

Textile industries generate a substantial amount of wastewater that contains significant quantities of dyes and hazardous metals, and their discharge into water sources is detrimental to humans, aquatic animals, and microorganisms. In this study, the adsorption process of reactive blue 21 dye with activated carbon has been investigated using the density functional theory (DFT) method. SEM, FTIR, XRD, and zeta potential analyses characterized the properties of the adsorbent. Based on the Box-Benken model results, under optimal conditions, a removal efficiency of 74.48% was obtained at an adsorbent dose of 3 g/L, pH 3, contact time of 30 min, and dye concentration of 10 mg/L. The adsorption process followed the Langmuir isotherm and the pseudo-second-order kinetic model. The mechanism of the adsorption process of reactive blue 21 dye on activated carbon was proposed using density functional theory and analysis of the adsorbent characteristics, including electrostatic interactions, hydrogen bonding, and π - π stacking.

بررسی فرایند جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ بر روی کربن فعال تولیدشده از الیاف درخت خرما

الهه دهقان دهنوی^{۱*}، شادی محمودی^۲، سیده مهتاب پورمازار^۳، آرش دالوند^۴

- ۱- کارشناس، مرکز تحقیقات علوم و فناوریهای محیط زیست، گروه مهندسی بهداشت محیط، دانشکده بهداشت، دانشگاه علوم پزشکی و خدمات بهداشتی درمانی شهید صدوقی، یزد، ایران، صندوق پستی: ۸۸۷.
- ۲- کمیته تحقیقات دانشجویی، دانشگاه علوم پزشکی و خدمات بهداشتی درمانی شهید صدوقی، یزد، ایران، صندوق پستی: ۸۸۷.
- ۳- دانشجوی کارشناسی ارشد، مرکز تحقیقات علوم و فناوریهای محیط زیست، گروه مهندسی بهداشت محیط، دانشکده بهداشت، دانشگاه علوم پزشکی و خدمات بهداشتی درمانی شهید صدوقی، یزد، ایران، صندوق پستی: ۸۸۷.
- ۴- دانشجوی دکتری تخصصی، مرکز تحقیقات علوم و فناوریهای محیط زیست، گروه مهندسی بهداشت محیط، دانشکده بهداشت، دانشگاه علوم پزشکی و خدمات بهداشتی درمانی شهید صدوقی، یزد، ایران، صندوق پستی: ۸۸۷.
- ۵- دانشیار، مرکز تحقیقات علوم و فناوریهای محیط زیست، گروه مهندسی بهداشت محیط، دانشکده بهداشت، دانشگاه علوم پزشکی و خدمات بهداشتی درمانی شهید صدوقی، یزد، ایران، صندوق پستی: ۸۸۷.

چکیده

صنایع نساجی مقدار زیادی پساب تولید می کنند که حاوی مقادیر قابل توجهی رنگزا و فلزات خطرناک بوده و تخلیه آن به منابع آبی برای انسان، آبزیان و میکروارگانیسمها مضر می باشد. در این مطالعه فرایند جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ با کربن فعال با روش تئوری تابعیت چگالی (DFT) مورد بررسی قرار گرفت. ویژگیهای جاذب با آزمونهای XRD، FTIR، SEM و پتانسیل زتا مشخص شد. بر اساس نتایج مدل باکس بنکن در شرایط بهینه بازده حذف ۷۴/۴۸ درصد در مقدار جاذب ۳ گرم بر لیتر، pH برابر ۳، زمان تماس ۳۰ دقیقه و غلظت رنگزای ۱۰ میلی گرم بر لیتر به دست آمد. فرایند جذب از ایزوترم لانگمویر و مدل سینتیک شبه درجه دوم تبعیت می کند. سازوکار فرایند جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ بر روی کربن فعال با استفاده از DFT و آزمون مشخصات جاذب، از نوع پیوندهای الکترواستاتیک، هیدروژنی و انباشتگی $\pi-\pi$ پیشنهاد شد.

اطلاعات مقاله

تاریخچه مقاله:
تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۱/۲۳
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۳/۲۶
در دسترس به صورت الکترونیکی: ۱۴۰۴/۰۴/۲۸
شاپا چاپی: ۲۲۵۱-۷۲۷۸
شاپا الکترونیکی: ۲۳۸۳-۲۲۲۳

DOI: 10.30509/jscw.2025.167519.1229

واژه های کلیدی:

جذب
کربن فعال
مدل سازی
رنگزای راکتیو بلو
الیاف خرما
تئوری تابعیت چگالی

۱- مقدمه

حدود ۷۱ درصد از سطح زمین پوشیده از آب است، اما تنها ۳ درصد آن آب شیرین است (۱). آلودگی آب یکی از نگران‌کننده‌ترین معضلات زیست‌محیطی در جهان است که نیازمند توجه و راه حل‌های مناسب است (۲). صنایعی مانند کاغذ، پلاستیک، چرم، لوازم آرایشی، مواد غذایی، پشم، فرش و منسوجات، از رنگ در فرایند تولید محصول استفاده می‌کنند (۳). یکی از صنایعی که در آلودگی آب نقش به‌سزایی دارند صنایع نساجی هستند. صنایع نساجی پساب‌های زیادی تولید می‌کنند که شامل آلاینده‌هایی است که برای انسان و همچنین آبزیان و میکروارگانیسم‌ها مضر است. رنگزاهای آلاینده‌های اصلی پساب نساجی هستند (۲). از نظر تاریخی، رنگ در جوامع بشری از اهمیت بالایی برخوردار بوده است. رنگزاهای که در ابتدا از مخلوط خاک و یا چربی حیوانی به دست می‌آمدند، برای رنگ‌آمیزی پوست انسان و اشیاء استفاده می‌شدند. در طول تاریخ، رنگزاهای غارنگاری، سرامیک و تحریر به کار رفته‌اند و با پیشرفت تمدن بشری استفاده از آن‌ها افزایش یافته است (۴).

برخی از رنگزاهای آلاینده سمی پایدار در آب هستند و برای مدت طولانی در محیط باقی می‌مانند و برای انسان منجر به بیماری‌های مختلف می‌شوند (۵). رنگزاهای بر حسب ساختار شیمیایی به دسته‌های مختلف آزو، آنتراکینون، زانتین، آکریدین، فلاوین، فتان سیانین و غیره و از لحاظ کاربردی به دسته‌های راکتیو، اسیدی، مستقیم، خمی، دیسپرس و غیره تقسیم می‌شوند (۶).

یکی از انواع پرکاربرد رنگزاهای راکتیو، رنگزای راکتیو بلو ۲۱ است. این رنگزا تحت عنوان Reactive Blue 21 (RB21) در دنیا شناخته می‌شود. فرمول شیمیایی این رنگزا $C_{40}H_{25}CuN_9O_{14}S_5$ می‌باشد. رنگزای راکتیو بلو ۲۱ جز گروه فتالوسیانین مس آنیونی و وزن مولکولی آن $1079/535 \text{ g/mol}$ است. این گروه از رنگزاهای به صورت بالقوه سمی و سرطان‌زا هستند (۷).

برخی از رنگزاهای باعث افزایش غلظت کروم، روی، مس، سرب و جیوه در آب‌های دریافت‌کننده می‌شوند که می‌توانند برای آبزیان بسیار سمی باشند. پساب رنگی تولیدشده نیز مانع از نفوذ نور خورشید می‌شود که منجر به کاهش فتوسنتز در گیاهان آبی می‌گردد. رنگزاهای مختلف آزو به خصوص رنگزاهای مبتنی بر بنزیدین بسیار خطرناک هستند و سبب جهش زایی و سرطان زایی نیز می‌شوند. همچنین اکسیژن محلول در آب را کاهش می‌دهند و به دلیل وجود مواد شیمیایی مانند سولفید هیدروژن باید قبل از رهاسازی در آب تصفیه شوند (۸). به دلیل شدت رنگ بالا و تنوع در ترکیب، تصفیه این پساب‌ها دشوار است (۹).

روش‌های مختلفی برای تصفیه پساب‌های رنگی از جمله جذب، تبادل یونی، انعقاد و لخته‌سازی، فرایندهای اکسایش پیشرفته، تجزیه زیستی،

ترسیب شیمیایی و سایر فرایندها وجود دارد (۱۰). در میان روش‌های مختلف، جذب به دلیل سهولت استفاده، هزینه کم، بازده بالا و قابلیت استفاده مجدد از جاذب‌ها، به عنوان انتخاب بهینه برای حذف رنگزاهای منابع آبی آلوده مطرح شده است. کربن فعال (AC)، به دلیل تخلخل بالا، سطح وسیع، سرعت جذب سریع و سهولت تولید پتانسیل قابل توجهی برای حذف فلزات، مواد آلی و سایر آلاینده‌های محیطی دارد (۱۲، ۱۱). البته ذکر این نکته لازم است که ظرفیت جذب جاذب‌ها محدود است که مستلزم احیا جاذب پس از اشباع آن به منظور استفاده مجدد آن می‌باشد. انتخاب نوع پیش‌ساز کربن فعال به هزینه، در دسترس بودن و محتوای کربن آن بستگی دارد (۱۳). تاکنون مطالعات متعددی جهت بررسی کارایی کربن فعال تهیه‌شده از پیش‌ماده‌های مختلف از جمله ساقه کنجد (۱۴)، کاه گندم (۱۴)، پوسته نارگیل (۱۵) و پوسته گردو (۱۶) در حذف رنگزاهای از پساب انجام شده است. با این حال، کربن فعال تولیدشده از لیف خرما به دلیل ساختار متخلخل، سطح ویژه بالا و گروه‌های عاملی غنی بر روی سطح، پتانسیل جذب بالاتری را نسبت به سایر جاذب‌های طبیعی نشان می‌دهد. این ویژگی‌های مطلوب ناشی از ترکیب لیگنوسلولزی منحصربه‌فرد لیف خرما و شرایط بهینه فعال‌سازی است که آن را به گزینه‌ای کارآمد و مقرون‌به‌صرفه برای تصفیه پساب‌ها تبدیل می‌کند (۱۲). در این مطالعه، جاذب مورد استفاده از لیف خرما ساخته شده است که نسبت به مواد استفاده شده برای تهیه جاذب در تحقیقات صورت گرفته مقرون‌به‌صرفه‌تر است. لیف خرما یک پسماند کشاورزی محسوب می‌شود که معمولاً دور ریخته می‌شود و در کشورهای دارای نخلستان‌های زیاد (مانند ایران، عراق، عربستان و غیره) به راحتی قابل تهیه است. بنابراین استفاده از آن به عنوان جاذب، روشی اقتصادی و دوست‌دار محیط‌زیست است. جاذب‌های طبیعی مانند لیف خرما معمولاً سمی نیستند و پس از استفاده می‌توانند بازیافت یا دفع شوند. با توجه به ویژگی‌های بیان‌شده جاذب مورد استفاده در این تحقیق از لیف درخت خرما تهیه شد و کارایی آن در حذف رنگزای راکتیو بلو ۲۱ از محیط آبی با بررسی متغیرهای مختلف به روش بهینه سازی توسط باکس-بنکن صورت گرفت. علاوه بر این، نوآوری این کار در استفاده از DFT برای درک جزئیات ساختاری و سازوکارهای شیمیایی در سطح اتمی است، که امکان تحلیل دقیق‌تر و جامع‌تری نسبت به روش‌های تجربی معمول فراهم می‌کند.

۲- بخش تجربی

۲-۱- تهیه کربن فعال

جاذب مورد استفاده در این مطالعه از الیاف درختان خرما شهرستان بافق یزد تهیه شد. برای این کار الیاف جمع‌آوری‌شده چندین مرتبه با آب شست‌وشو شد. برای خرد شدن راحت‌تر، الیاف داخل آون به مدت

¹ Activated Carbon

Bruker advance d8، ساخت کشور آلمان، برای تعیین ترکیب شیمیایی کربن فعال استفاده شد. از دستگاه FTIR، مدل L1600300 ساخت کشور انگلستان برای تعیین گروه‌های عاملی جاذب استفاده شد.

برای اندازه‌گیری سطح ویژه، از روش سیر استفاده شد. بدین منظور، مقدار ۰/۵ گرم کربن فعال خام اندازه‌گیری شد و به آن ۵۰ میلی‌لیتر محلول اسید کلریدریک ۰/۱ مولار (HCl 0.1 M) اضافه گردید. سپس، مقدار ۱۰ گرم سدیم کلرید (NaCl) به محلول افزوده شد و مخلوط حاصل تحت هم‌زدن با هم‌زن مغناطیسی قرار گرفت. پس از آن، محلول در یک حمام آب با دمای ثابت ۲۹۸ کلوین (۲۵ درجه سانتی‌گراد) با استفاده از محلول استاندارد هیدروکسید سدیم ۰/۱ مولار (NaOH 0.1 M) تیتر شد. تیتر کردن ابتدا تا رسیدن به pH برابر ۴ و سپس تا pH برابر ۹ ادامه یافت. حجم NaOH مصرفی برای افزایش pH از ۴ به ۹ ثبت گردید.

سطح ویژه بر حسب مترمربع بر گرم با استفاده از رابطه ۳ محاسبه شد.

$$S = 32V - 25 \quad (3)$$

S سطح ویژه (m²/g) و V حجم محلول NaOH مصرف شده (بر حسب میلی‌لیتر) برای افزایش pH از ۴ به ۹ می‌باشد (۱۸). علاوه بر این، پتانسیل زتا جاذب با استفاده از دستگاه مدل SZ-100، شرکت Horiba ساخت کشور ژاپن سنجش گردید.

۲-۴- طراحی آزمایش با استفاده از روش سطح پاسخ (RSM)

یکی از روش‌هایی که اغلب برای تحلیل و مدل‌سازی آزمایش استفاده می‌شود، RSM است که در این تحقیق نیز از آن استفاده شد. RSM بر اساس طراحی باکس بنکن^۵ (BBD) با استفاده از نرم‌افزار Design Expert 11 انجام گرفت. متغیرهای مختلف مانند غلظت رنگزا (۱۰، ۵۵ و ۱۰۰ میلی‌گرم بر لیتر)، مقدار جاذب (۰/۱، ۱/۵۵ و ۳ گرم بر لیتر) و زمان تماس (۲، ۱۶ و ۳۰ دقیقه) که بر حذف رنگزا توسط جاذب مؤثر هستند، بررسی شدند. در جدول ۱، متغیرها و محدوده‌ی آن‌ها مشخص شده است. برای پردازش نتایج و مدل‌سازی فرایند از معادله رگرسیون چندجمله‌ای درجه دوم در رابطه ۴ استفاده شد.

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^K \beta_i X_i + \sum_{i=1}^K \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^K \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon \quad (4)$$

در رابطه ۴، Y درصد حذف رنگزا را نشان می‌دهد، β_0 ضریب ثابت، β_i ضریب خطی، β_{ii} درجه دوم و β_{ij} برهمکنش می‌باشد. X_i یا X_j متغیرها هستند. K و ε به ترتیب تعداد عوامل مورد مطالعه و خطای تصادفی هستند (۱۹، ۱۸).

۲۴ ساعت در دمای ۱۲۰ درجه سانتی‌گراد خشک شد. الیاف خشک‌شده خرد و آسیاب شدند و برای هم‌اندازه شدن از الک مش ۴۵ عبور داده شدند. الیاف الک‌شده، با عامل فعال‌کننده شیمیایی، اسید فسفریک به نسبت ۱:۱ مخلوط شدند و در آون در دمای ۶۰ درجه سانتی‌گراد، ۱۲ ساعت خشک شدند. برای تکمیل فرایند، نمونه خشک‌شده در کوره (مدل TEF1200-30-9 H&V، ساخت ایران) تحت نیتروژن در دمای ۵۵۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۲ ساعت قرار داده شد. برای خنثی شدن pH کربن تفکافت‌شده، نمونه با محلول HCL ۰/۱ مولار به مدت ۲۰ دقیقه روی گرمکن جوشانده و چندین بار با آب مقطر شسته شد و در دمای ۶۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۱۲ ساعت خشک شد.

۲-۲- آزمایش جذب

برای تهیه محلول مادر رنگزا راکتیو بلو ۲۱ با غلظت ۱۰۰۰ میلی‌گرم بر لیتر، ۱ گرم پودر رنگزا در آب مقطر حل شد و از محلول به دست آمده غلظت‌های مختلف رنگزا تهیه شد. ۲۵ میلی‌لیتر محلول حاوی غلظت‌های مختلف رنگزا داخل ارلن ریخته و مقدار مشخص جاذب به آن اضافه شد، سپس pH نمونه‌ها با استفاده از pH متر ساخت تایوان تنظیم شد و در زمان‌های مختلف روی شیکر هم‌زده شد. پس از مدت معین، جاذب‌ها ته‌نشین شدند و پساب روی آن‌ها جدا شد و غلظت رنگزای راکتیو بلو ۲۱ با استفاده از طیف‌سنجی در طول موج ۶۶۱ نانومتر طیف‌سنجی مدل (DR6000 ساخت آمریکا) مشخص شد. از روابط ۱ و ۲ برای محاسبه مقدار حذف رنگزا و ظرفیت جذب استفاده شد.

$$R(\%) = \frac{C_0 - C_e}{C_0} \times 100 \quad (1)$$

$$q_e = \frac{(C_0 - C_e)V}{M} \quad (2)$$

که در رابطه‌ها C_0 و C_e به ترتیب غلظت اولیه و غلظت نهایی بر حسب میلی‌گرم بر لیتر، q_e ظرفیت جاذب بر حسب میلی‌گرم بر گرم، V حجم محلول بر حسب لیتر و M جرم جاذب بر حسب گرم هستند (۱۷).

۲-۳- مشخصات جاذب

مشخصات کربن فعال سنتز شده توسط آزمون‌های FTIR، SEM، BET، XRD و پتانسیل زتا بررسی شد. در این تحقیق، ریخت سطوح جاذب، شکل و اندازه کربن فعال اصلاح شده به وسیله میکرو سکوپ الکترونی روبشی^۶ (SEM) ساخت شرکت TESCAN، سری ۱۰۱۰ کشور جمهوری چک بررسی شد. از آنالیز XRD^۷، دستگاه مدل

⁵ Sear's method

⁶ Response Surface Methodology

⁷ Box Behnken Design

¹ Pyrolysis

² Scanning Electron Microscopy

³ X-ray diffraction

⁴ Fourier Transform Infrared

با استفاده از نمودارهای مقایسه مقادیر مشاهده شده و مقادیر پیش‌بینی شده و توزیع احتمال نرمال بررسی شد (شکل ۲). بر اساس شکل ۲a، یک همبستگی قوی بین مقادیر تجربی و پیش‌بینی شده حذف رنگزای راکتیو بلو ۲۱ توسط کربن فعال مشاهده شد که نشان می‌دهد مدل دارای خطای ناچیز است، بنابراین دقت بالای آن را در پیش‌بینی تابع غیرخطی نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۲b نشان داده شده است، توزیع نقاط داده نزدیک به خط مستقیم رضایت بخش است که استقلال باقی‌مانده‌ها و اعتبار مفروضات را تایید می‌کند (۲۰، ۲۱).

جدول ۱: متغیرها و سطوح مختلف آن‌ها.

Table 1: Variables and their different levels.

Variable	Unit	Code	Variable level		
			-1	0	1
Adsorbent dose	g/L	A	0.1	1.55	3
Dye concentration	mg/L	B	10	55	100
Time	min	C	2	16	30

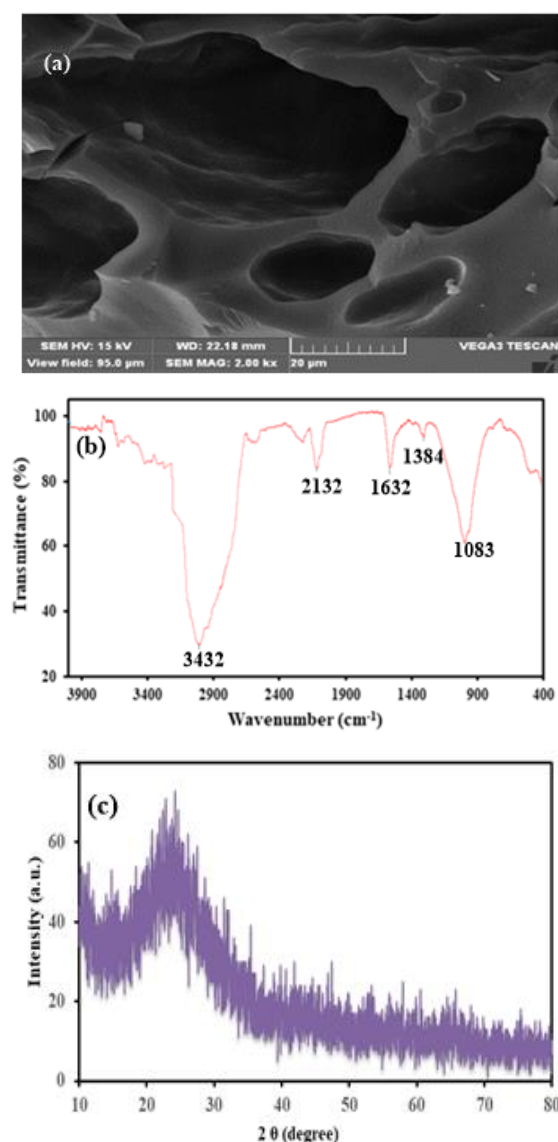
۳- بحث و نتایج

۳-۱- ویژگی‌ها و مشخصات جاذب

آزمون SEM برای تعیین مشخصات و ریخت کربن فعال استفاده شد. شکل a ۱ تصویر SEM جاذب را نشان می‌دهد. این تصویر به خوبی تخلخل و منافذ سطح جاذب را نشان می‌دهد که بیانگر کارآمدی بالای آن در جذب رنگزا است. همچنین مشخص است کربن فعال تهیه‌شده از الیاف نخل دارای اندازه منافذ پراکنده است، بنابراین برای جذب آلاینده‌ها با اندازه‌های مولکولی مختلف کارآمد است. آزمون سطح ویژه کربن فعال طبق رابطه ۳ محاسبه شد. میزان سطح ویژه جاذب m^2/g ۱۱۵۹ بود، که نشان‌دهنده سطح بسیار بالا و قابلیت بالای جذب این ماده است. جاذب کربن فعال با سطح ویژه زیاد، توانایی حذف درصد قابل توجهی از رنگزاهای را داشته و به عنوان یک عامل مؤثر در فرایندهای تصفیه و خالص‌سازی عمل می‌کند. آزمون FTIR در محدوده بسامد $500-4000\text{ cm}^{-1}$ برای تعیین گروه‌های عاملی کربن فعال انجام شد و نتایج آن در شکل b ۱ نشان داده شده است. قله 3432 cm^{-1} به پیوند کششی O-H نسبت داده می‌شود. قله 2132 cm^{-1} به ارتعاش کششی C-H اختصاص داده شد، و نوارهای جذب در 1632 cm^{-1} مربوط به پیوند C=C در ساختار کربن فعال است. قله 1384 cm^{-1} مربوط به ارتعاش کششی C-H کربن فعال است. همچنین، قله مشاهده‌شده در 1083 cm^{-1} ، ارتعاش کششی C-O کربن فعال را نشان می‌دهد. شناسایی گروه‌های هیدروکسیل، گروه‌های کربونیل و گروه اترها در ساختار مواد کربنی نشان می‌دهد که الیاف نخل دارای ساختار لیگنوسلولزی هستند که قبلاً در ضایعات مختلف نخل گزارش شده است (۱۲). شکل c ۱c الگوی XRD کربن فعال را نشان می‌دهد. ظهور یک پراکندگی وسیع بین 20° و 25° درجه در آزمون XRD نشان‌دهنده وجود کربن است. عدم وجود قله‌های اضافی نشان می‌دهد که هیچ ترکیب قابل تشخیص دیگری با اشعه ایکس در نمونه کربن فعال وجود ندارد.

۳-۲- طراحی باکس-بنکن

با استفاده از طراحی باکس-بنکن، تعداد ۱۷ آزمایش برای بررسی تاثیر متغیرهای مستقل بر بازده حذف رنگزای راکتیو بلو ۲۱ توسط کربن فعال انجام شد و نتایج در جدول ۲ ارائه شده است. صحت مدل



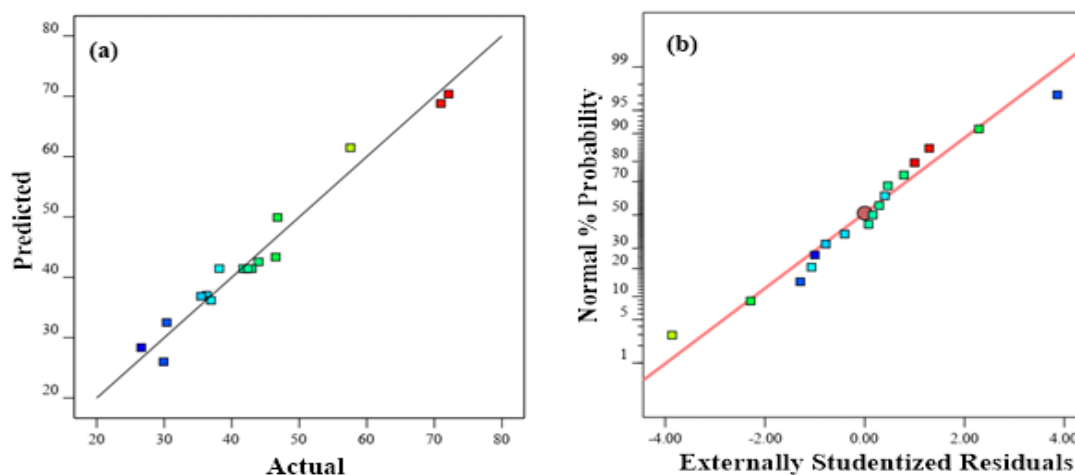
شکل ۱: تصویر آزمون‌های SEM (a)، طیف FTIR (b) و XRD (c) کربن فعال تهیه‌شده از الیاف نخل خرما.

Figure 1: Image of (a) SEM, (b) FTIR spectrum, and (c) XRD analyses of activated carbon prepared from date palm fibers.

جدول ۲: طراحی باکس-بنکن و مقدار تابع پاسخ.

Table 2: Box-Behnken design and response function value.

Run	Adsorbent dose (g/L)	Dye concentration (mg/L)	Time (min)	R%
1	0.1	10	16	36.29
2	0.1	100	16	26.61
3	1.55	10	2	46.77
4	0.1	55	2	29.9
5	1.55	55	16	38.15
6	3	55	2	43.97
7	1.55	100	2	30.36
8	1.55	55	16	42.97
9	1.55	55	16	41.98
10	1.55	55	16	42.41
11	3	10	16	72.1
12	1.55	10	30	70.96
13	0.1	55	30	35.46
14	3	100	16	36.93
15	1.55	100	30	46.5
16	3	55	30	57.58
17	1.55	55	16	41.7



شکل ۲: (a) نمودار داده‌های تجربی در برابر داده‌های پیش‌بینی شده و (b) نمودار احتمال نرمال برای حذف رنگزای راکتیو بلو ۲۱ توسط کربن فعال.

Figure 2: (a) Plot of experimental data versus predicted data, and (b) normal probability plot for reactive blue 21 dye removal by activated carbon.

که نشان‌دهنده مناسب بودن مدل است. تنها ۰/۰۵ درصد احتمال وقوع چنین مقدار F بزرگی است که باعث تغییرات تصادفی یا اختلال می‌شود (۲۲). ضریب همبستگی (R^2)، ۰/۹۸۷۸، به دست آمد که نزدیک به ۱ است، بنابراین پاسخ‌های مشاهده شده با مدل مطابقت دارد.

۳-۳- تحلیل رگرسیون چندجمله‌ای و آزمون واریانس

به منظور تحلیل داده‌ها، آزمون واریانس (ANOVA) انجام شد و نتایج در جدول ۳ ارائه شده است. با توجه به نتایج آماری مقدار P مدل کمتر از ۰/۰۵ است که نشان می‌دهد مدل معنی دار است. مقدار F مدل ۲۳/۳۴

جدول ۳: نتایج آزمون واریانس (ANOVA) برای حذف رنگزای راکتیو

توسط کربن فعال.

Table 3: Results of analysis of variance (ANOVA) for removal of reactive reactive blue 21 dye by activated carbon.

Parameter	Sum of squares	Df	Mean squares	F-value	P-value
Model	2543.66	9	282.63	23.34	< 0.0002
A	847.07	1	847.07	69.95	< 0.0001
B	918.49	1	918.49	75.85	< 0.0001
C	442.53	1	442.53	36.55	< 0.0001
AB	162.44	1	162.44	13.41	< 0.0001
AC	16.20	1	16.20	1.34	< 0.008
BC	16.20	1	16.20	1.34	0.2854
A ²	30.46	1	30.46	2.52	0.2854
B ²	75.35	1	75.35	6.22	0.1567
C ²	37.27	1	37.27	3.08	0.0413
Residual	84.76	7	12.11	-	0.1228
Lack of Fit	70.30	3	23.43	6.48	0.0514
Pure Error	14.47	4	3.62	-	-
Cor Total	2628.42	16	-	-	-

ضریب همبستگی تعدیل شده^۱ برابر با ۰/۹۲۶۳ بوده که مقدار بالایی را نشان می‌دهد و اعتبار مدل را تقویت می‌کند. عامل دقت کافی^۲ که نشان‌دهنده نسبت سیگنال به خطا است، برابر با ۱۶/۶۱۶۴ بود. این مقدار نشان می‌دهد که سیگنال در مدل کافی است و می‌توان از آن برای هدایت فرایند طراحی بهره برد (۲۳، ۲۴). در این تحلیل، مقدار F برای عدم تطابق^۳ برابر با ۶/۴۸ است که نشان می‌دهد احتمال وقوع این مقدار F به واسطه خطا حدود ۵/۱۴ درصد است.

بر اساس نتایج تحلیل آماری، متغیرهای A، B، C، تعامل AB و A² با مقادیر P کمتر از ۰/۰۵ در سطح معنی‌داری قرار دارند و بنابراین در مدل معنی‌دار هستند. ضرایب رگرسیون با استفاده از روش رگرسیون چند جمله‌ای برآورد شد. معادله چند جمله‌ای درجه دوم به دست آمده از مدل برای بازده حذف رنگزا در رابطه ۵ قابل مشاهده است.

$$\text{Dye Removal (\%)} = +41.44 + 10.29A - 10.71B + 7.44C - 6.37AB + 2.01AC - 2.01BC - 2.69A^2 + 4.23B^2 + 2.98C^2 \quad (5)$$

با توجه به ضرایب موجود در رابطه ۵ متغیرهای مستقل، مقدار کربن فعال، غلظت رنگزای راکتیو و زمان تماس به صورت A، B، C در

مدل کدگذاری شد. علائم مثبت و منفی در رابطه نشانه تأثیر مستقیم و تأثیر غیرمستقیم بر بازده حذف رنگزا است. بنابراین زمان تماس و مقدار کربن فعال تأثیر مستقیم و غلظت رنگزا تأثیر عکس بر بازده حذف رنگزا دارد.

۳-۴- اثر متغیرهای بررسی شده

اثر هم‌زمان متغیرهای مختلف بر قابلیت حذف آلاینده توسط کربن فعال تهیه‌شده از الیاف خرما با استفاده از نمودارهای سه‌بعدی (3D) سطح پاسخ مورد بررسی قرار گرفت و نتایج در شکل ۳ ارائه شده است. بر اساس شکل ۳a، b افزایش مقدار جاذب از ۰/۱ به ۳ گرم بر لیتر باعث افزایش بازده حذف رنگزا شده است (۲۵). افزایش مقدار جاذب نشان‌دهنده سطح جذب بالاتر و تعداد بیشتر منافذ جذب در دسترس است (۲۶). مطالعه‌ای مشابه توسط محمد^۴ و همکاران انجام شده است که گزارش کردند با افزایش مقدار جاذب حذف رنگزا افزایش می‌یابد (۲۷). شکل (۲a، c) نشان می‌دهد که بازده حذف رنگزای راکتیو بلو ۲۱ با افزایش زمان تماس، افزایش یافته است. این نتیجه به این دلیل است که مولکول‌های رنگزا با افزایش زمان تماس فرصت مناسب جهت جذب در محل‌های خالی بر روی کربن فعال را دارند (۲۸، ۲۹). تأثیر زمان تماس بر حذف رنگزا در شکل ۲b، c ارائه شده است. بومیگ^۵ و همکارانش نیز به نتایج مشابهی رسیده‌اند (۲۹).

مطابق شکل ۲a، c با افزایش غلظت رنگزای راکتیو بلو ۲۱ از ۱۰ به ۱۰۰ میلی‌گرم بر لیتر، درصد حذف رنگزا کاهش می‌یابد. کربن فعال دارای تعداد محدودی منافذ خالی است که در غلظت بالای رنگزا این منافذ و مکان‌ها اشباع شده، بنابراین بازده حذف کاهش می‌یابد (۳۱). ردایی و همکارانش در مطالعه مشابهی دریافتند که با کاهش غلظت اولیه رنگزا، بازده حذف افزایش می‌یابد (۳۲).

با استفاده از طراحی باکس-بنکن شرایط بهینه برای فرایند جذب تعیین شد. با توجه به مدل پیشنهاد شده، در شرایط غلظت رنگزای ۱۰ میلی‌گرم بر لیتر، pH برابر ۳، مقدار جاذب ۳ گرم بر لیتر و زمان تماس ۳۰ دقیقه، بالاترین بازده حذف رنگزا ۷۴/۴۸ درصد به دست آمد.

۳-۵- اثر pH بر جذب

pH یکی از متغیرهای کلیدی است که می‌تواند بر فرایند جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ توسط کربن فعال تأثیر گذارد. تغییرات در pH می‌تواند نرخ جذب و ظرفیت جذب را تحت تأثیر قرار دهد، به‌خصوص در سیستم‌های آبی که تغییرات اسیدی یا بازی ممکن است ساختار و بار سطحی جاذب را دستخوش تغییر قرار دهد.

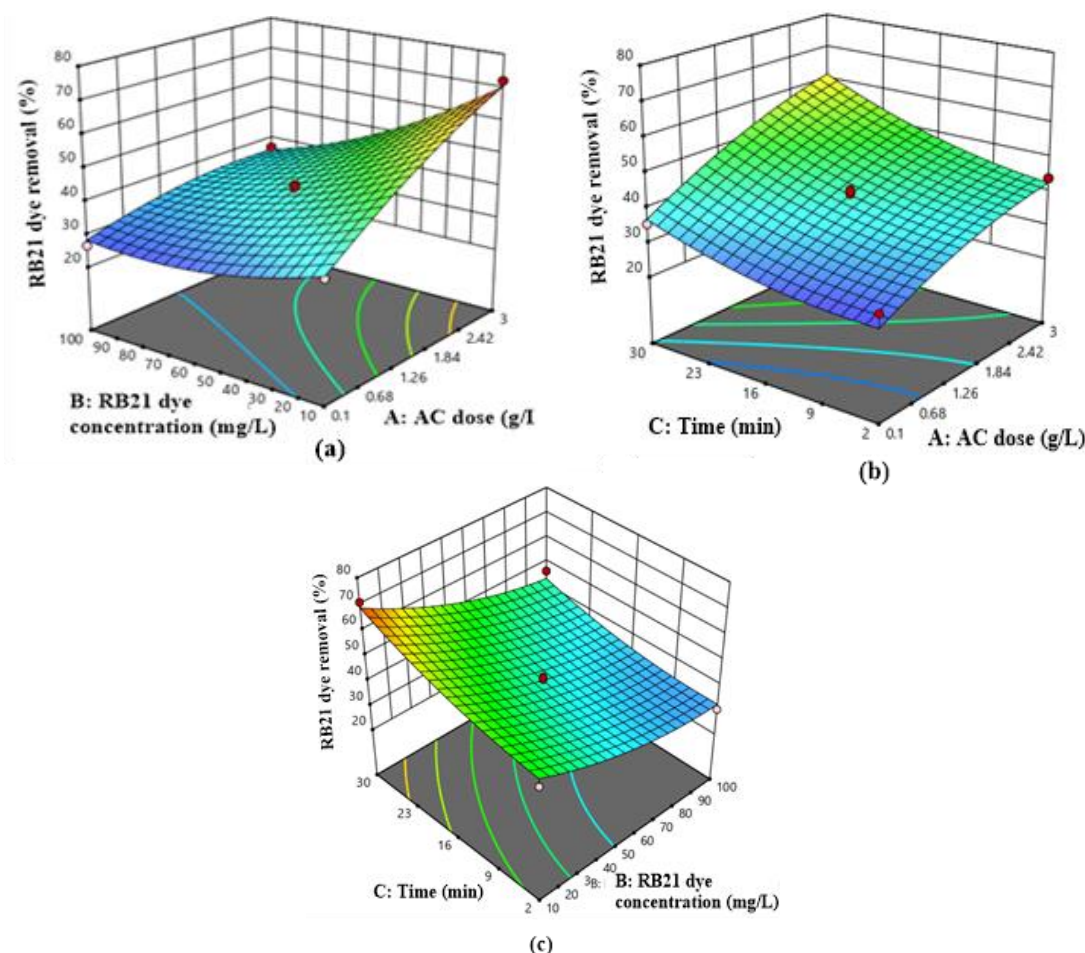
⁴ Mohammed

⁵ Bhomick

¹ Adjusted R²

² Adeq Precision

³ Lack of Fit



شکل ۳: تأثیر متغیرها بر بازده حذف رنگزای راکتیو بلو ۲۱ توسط کربن فعال.

Figure 3: Effect of parameters on the removal efficiency of reactive blue 21 dye by activated carbon.

با یون هیدروکسید در رقابت هستند. بنابراین هر چه یون‌های هیدروکسید در محل کمتر باشد رنگزها فرصت بیشتری دارند تا منافذ را اشغال کنند و جذب رنگزا راکتیو افزایش می‌یابد، در نتیجه pH مناسب برای حداکثر جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ بر روی کربن فعال ۳ می‌باشد (۳۳، ۳۴). وانگ^۱ به بررسی کارایی کربن فعال تهیه‌شده از ضایعات مامبو در حذف رنگ آزو پرداخت و به نتایج مشابهی دست یافت (۳۵).

۳-۶- ایزوترم جذب

ایزوترم‌های جذب اطلاعات مهمی در باره‌ی توزیع و ظرفیت جذب جذب در شرایط پایدار ارائه می‌دهند. این اطلاعات برای توسعه مدل‌های ریاضی و پیش‌بینی رفتار جذب در مقیاس‌های بزرگ ضروری است.

همچنین pH می‌تواند بر ساختار رنگزها که در محلول قرار دارند تأثیر گذارد. برخی از رنگزها در pHهای مختلف می‌توانند به صورت یونیده یا غیر یونیده وجود داشته باشند. حالت یونیده آنها ممکن است توانایی بیشتری برای جذب سطحی بر روی کربن فعال داشته باشد، در حالی که حالت‌های غیر یونیده ممکن است به راحتی در محلول باقی بمانند. در واقع، pH محیط می‌تواند بر ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی جاذب و همچنین رفتار آلاینده‌ها تأثیر گذارد.

در این مطالعه اثر pH در سه سطح ۳، ۵ و ۷ در شرایط بهینه زمان تماس ۳۰ دقیقه، غلظت رنگزا ۱۰ میلی گرم بر لیتر و مقدار جاذب ۳ گرم بر لیتر بررسی شد و نتایج آن در شکل ۴ نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود، با کاهش pH از ۷ به ۳، جذب رنگزا بر کربن فعال تهیه شده از الیاف خرما افزایش یافته است. زیرا با کاهش pH غلظت یون هیدروکسید کاهش و غلظت یون هیدروژن افزایش می‌یابد و از آنجا که رنگزهای راکتیو از نوع آنیونی می‌باشند،

¹ Wang

که در آن، β ثابت ایزوترم دوبینین-رادوشکویچ است که با انرژی میانگین جذب سطحی (E) مرتبط است و ϵ پتانسیل پولانی^۱ است که انرژی لازم برای انتقال یک مول ماده جذبشونده از محلول به سطح جاذب را بیان می‌کند.

عوامل مدل‌های ایزوترم در شکل ۵ و جدول ۴ ارائه شده است. بر اساس داده‌های به دست آمده جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ با ضریب همبستگی ($R^2=0.916$) به مدل جذب لانگمویر نزدیک است. بنابراین فرایند جذب رنگزا روی جاذب تهیه شده، حاکی از جذب یک‌لایه و یکنواخت ماده جذب شونده با انرژی یکسان بر تمام سطوح روی جاذب است.

جذب فیزیکی معمولاً با نیروهای واندروالسی، برهم‌کنش‌های سطحی ضعیف، یا نفوذ مولکول‌ها در ساختار متخلخل جاذب (مانند کربن فعال) انجام می‌گیرد و نیازی به شکستن پیوندهای شیمیایی قوی ندارد. بر اساس نتایج، مقدار n ایزوترم فروندلیش از نظر فیزیکی بیانگر میزان مطلوبیت جذب و نوع آن (فیزیکی یا شیمیایی) است. بر اساس گزارش‌ها، مقادیر n در این مطالعه ۱/۵۷ بود که در محدوده $1 < n < 10$ معمولاً نشان‌دهنده فرایند جذب مطلوب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ بر روی کربن فعال است (۳۶).

۳-۷- سینتیک جذب

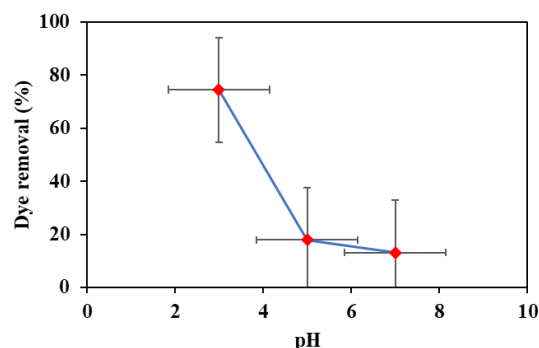
سینتیک جذب یک فرایند کلیدی برای درک دینامیک حذف رنگزای راکتیو با استفاده از کربن فعال است. مطالعه سینتیک فرایند کمک می‌کند تا سرعت و سازوکارهای جذب شناسایی شود و بهینه‌سازی شرایط عملیاتی را ممکن می‌سازد. از معادلات سینتیک شبه درجه اول، شبه درجه دوم و مدل نفوذ درون‌ذره‌ای برای آنالیز داده‌ها استفاده شد. سینتیک شبه درجه اول با رابطه خطی ۹ به دست آمد.

$$\log(q_e - q_t) = \log q_e - \frac{k_1 t}{2.303} \quad (9)$$

در رابطه ۹، q_t ظرفیت جذب در هر زمان، k_1 ثابت سرعت واکنش درجه اول و q_e ظرفیت جذب در حالت تعادل هستند که از رسم تغییرات $\log(q_e - q_t)$ در مقابل t حاصل می‌شوند. شکل خطی سینتیک شبه درجه دوم با استفاده از معادله ۱۰ محاسبه شد.

$$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{k_2 q_e^2} + \frac{t}{q_e} \quad (10)$$

در رابطه ۱۰، q_t ظرفیت جذب در هر زمان، k_2 ثابت سرعت واکنش شبه درجه دوم و q_e ظرفیت جذب در حالت تعادل است. در این معادله q_t ظرفیت جذب در هر زمان، k_2 ثابت سرعت واکنش شبه درجه دوم و q_e ظرفیت جذب در حالت تعادل است. به منظور بررسی سازوکار انتقال جرم و تعیین مرحله محدودکننده در فرایند جذب، از مدل نفوذ درون‌ذره‌ای استفاده شد.



شکل ۴: اثر pH بر بازده جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ توسط کربن فعال.

Figure 4: Effect of pH on reactive blue 21 dye adsorption efficiency by activated carbon.

تحلیل ایزوترم‌های مختلف، مانند مدل‌های لانگمویر، فروندلیش و مدل ایزوترم دوبینین-رادوشکویچ، می‌تواند به درک بهتری از سازوکارهای جذب و ظرفیت‌های نهایی کربن فعال در حذف رنگزای راکتیو کمک کند. مدل ایزوترم لانگمویر بر مبنای جذب یک‌لایه و یکنواخت ماده جذب شونده با انرژی یکسان بر تمام سطوح روی جاذب است. مدل ایزوترم لانگمویر با رابطه خطی ۶ محاسبه شد.

$$\frac{1}{q_e} = \frac{1}{q_{\max}} + \frac{1}{b q_{\max} C_e} \quad (6)$$

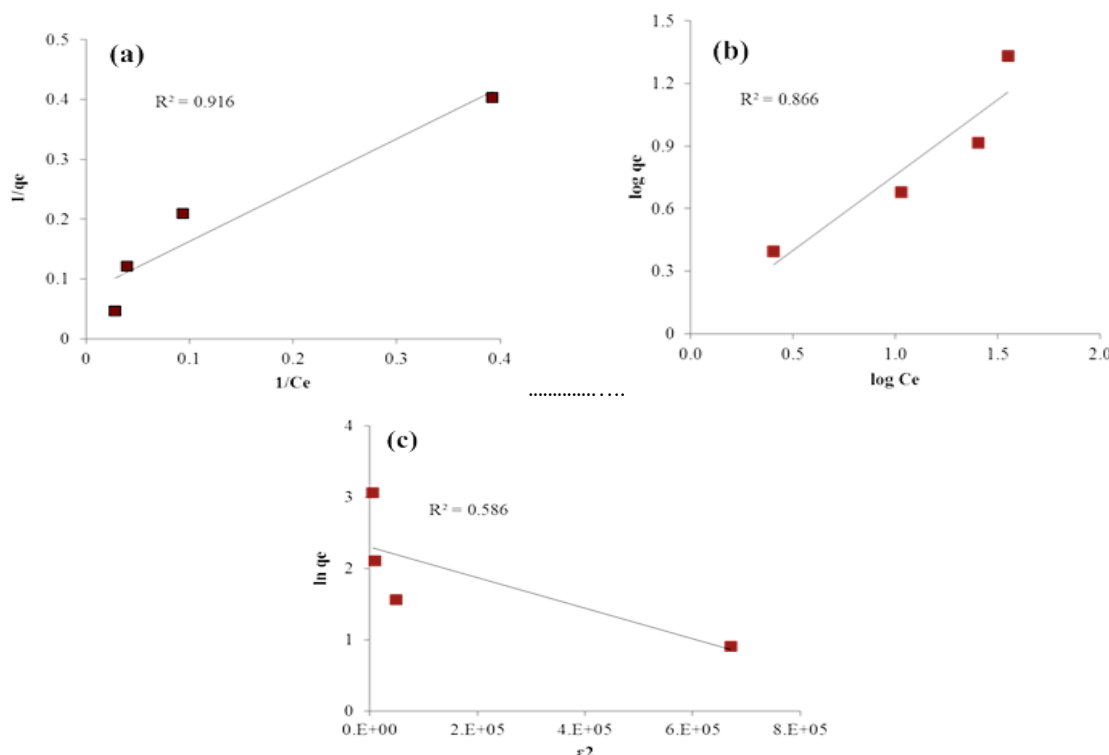
در رابطه ۶، C_e غلظت تعادلی بر حسب میلی‌گرم بر لیتر، q_e مقدار رنگ جذب شده در زمان تعادل بر حسب میلی‌گرم بر گرم و b ثابت لانگمویر است. ایزوترم فروندلیش برخلاف مدل لانگمویر، بر مبنای جذب چندلایه و ناهمگن ماده جذب شونده روی جاذب بوده و رابطه خطی آن به صورت رابطه ۷ است.

$$\log q_e = \log k_f + \log C_e + \frac{1}{n} \quad (7)$$

در رابطه ۷، C_e غلظت تعادلی رنگزا بر حسب میلی‌گرم بر لیتر، q_e مقدار رنگزا جذب شده در زمان تعادل بر حسب میلی‌گرم بر گرم، K_f و n ثابت‌های فروندلیش هستند. مقادیر پارامترهای K_f و n به ترتیب از طریق شیب و عرض از مبدأ نمودار خطی $\log q_e$ در مقابل $\log C_e$ تعیین شد. مدل ایزوترم دوبینین-رادوشکویچ جهت بررسی ماهیت فیزیکی یا شیمیایی بودن فرایند جذب و نیز پیش‌بینی ظرفیت جذب در سطوح ناهمگن به کار می‌رود. این مدل فرض می‌کند که جذب بر اثر پتانسیل‌های گسسته موجود در سطح جاذب انجام می‌شود و نیازی به فرض یکنواختی سطح یا جذب تک‌لایه‌ای ندارد. فرم خطی این مدل به صورت رابطه ۸ بیان می‌شود.

$$\ln q_e = \ln q_m - \beta \epsilon^2 \quad (8)$$

¹ Polanyi potential



شکل ۵: مدل‌های ایزوترم (a) لانگمویر، (b) فروندلیش و (c) دوبینین-رادشکوویچ برای جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ توسط کربن فعال.

Figure 5: (a) Langmuir, (b) Freundlich, and (c) Dubinin-Radushkevich isotherm models for reactive blue 21 dye adsorption by activated carbon.

که ضریب k_{int} نرخ نفوذ درون‌ذره‌ای با واحد $\text{mg/g} \cdot \text{min}^{0.5}$ ، t زمان تماس برحسب دقیقه و C مقدار ثابتی است که نشان‌دهنده ضخامت لایه مرزی می‌باشد (۳۶).

شکل ۶ و جدول ۵ مقادیر محاسبه شده ثابت‌های سینتیک را برای جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ روی کربن فعال نشان می‌دهد. بر اساس ضریب همبستگی (R^2)، جذب رنگزا بیش‌ترین همبستگی را با مدل شبه درجه دوم داشت.

در مدل نفوذ درون‌ذره‌ای در صورتی که نمودار q_t برحسب $t^{0.5}$ به صورت خطی با عرض از مبدأ صفر باشد (یعنی $C=0$)، نفوذ درون‌ذره‌ای تنها مرحله محدودکننده سرعت جذب محسوب می‌شود. اما اگر خط دارای عرض از مبدأ باشد، این امر نشان‌دهنده وجود مرحله‌های دیگر مانند نفوذ سطحی یا لایه مرزی در کنار نفوذ درون‌ذره‌ای است. از آنجایی که مقدار C بزرگ‌تر از صفر است، می‌توان نتیجه گرفت که نفوذ درون‌ذره‌ای تنها مرحله تعیین‌کننده نرخ جذب نبوده و مرحله‌ای از انتقال جرم در لایه مرزی نیز در فرایند جذب دخالت دارد. این یعنی ابتدا رنگزا از محلول به سطح ذرات جاذب انتقال یافته و سپس در ساختار متخلخل جاذب نفوذ کرده است (۳۶).

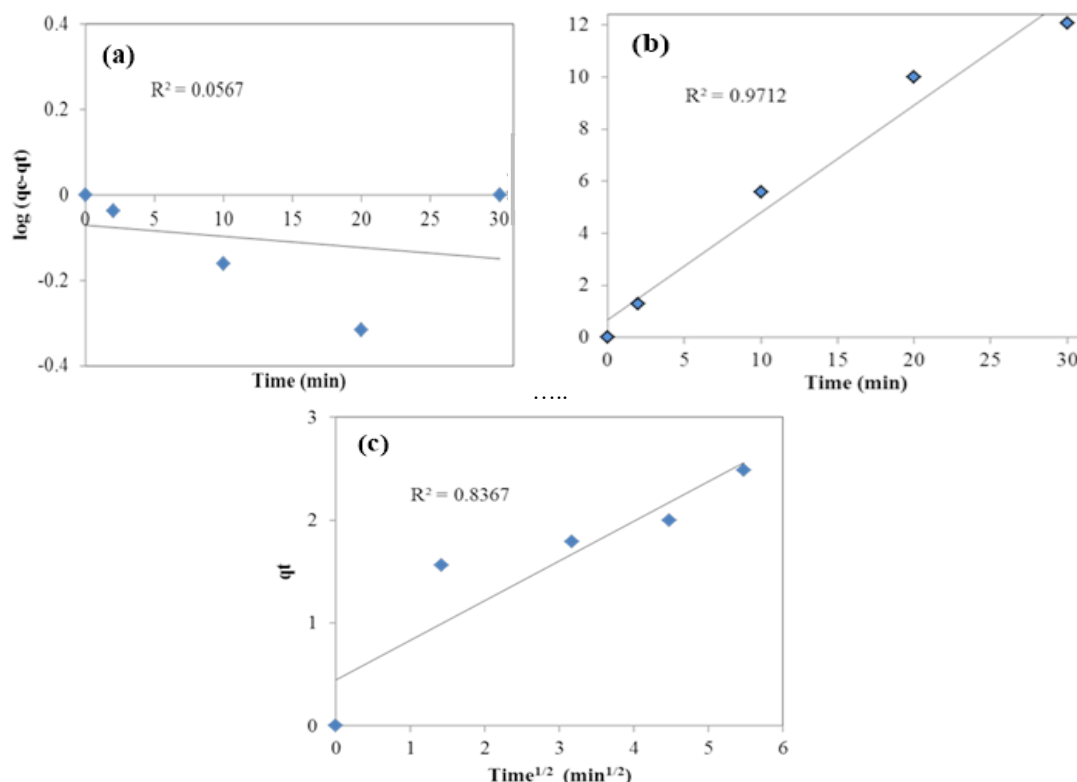
جدول ۴: عوامل ایزوترم لانگمویر، فروندلیش و دوبینین-رادشکوویچ جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ توسط کربن فعال.

Table 4: Langmuir, Freundlich and Dubinin-Radushkevich isotherm parameters of reactive blue 21 dye adsorption by activated carbon.

Isotherm model	Isotherm coefficients	Values
Langmuir	$q_{\max}$ (mg/g)	13.054
	K_L (L/mg)	0.089
	R^2	0.916
Freundlich	K_F (mg/g)(L/mg) $^{1/n}$	1.089
	n	1.385
	R^2	0.866
Dubinin-Radushkevich	$q_{\max}$ (mg/g)	10.019
	E	0.5
	R^2	0.586

این مدل، بر مبنای این فرض استوار است که نفوذ ماده جذب‌شونده در داخل خلل و فرج جاذب، یکی از مراحل اصلی تعیین‌کننده سرعت جذب می‌باشد. شکل خطی شده این مدل به صورت رابطه ۱۱ بیان می‌شود.

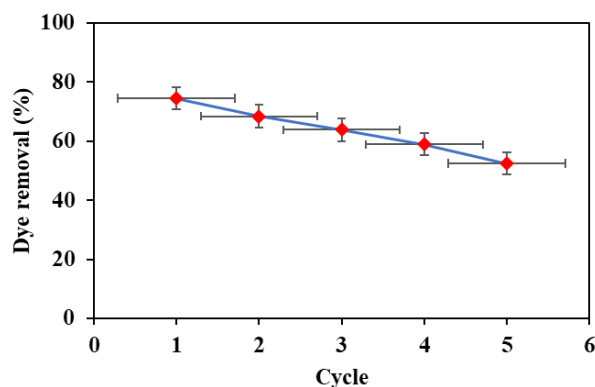
$$q_t = k_{int} t^{0.5} + C \quad (11)$$



شکل ۶: مدل‌های سینتیک (a) شبه درجه اول، (b) شبه درجه دوم و (c) نفوذ درون‌ذره‌ای برای جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ توسط کربن فعال.

Figure 6: (a) Pseudo-first-order (b) Pseudo-second-order and (c) Intraparticle diffusion kinetic models for reactive blue 21 dye adsorption by activated carbon.

سود ۰/۱ مولار و آب مقطر شسته شد و برای مرحله بعدی آماده شد. کربن فعال دوباره در فرایند جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ استفاده شد و بازده حذف رنگزا محاسبه شد. نتایج نشان داد که بازده حذف در چرخه اول ۷۴/۴۸ درصد و پس از پنج چرخه ۵۲/۴۳ درصد بوده است (شکل ۷). این یافته‌ها نشان می‌دهد که کربن فعال پایدار است و می‌تواند به طور متوالی با کاهش اندک در بازده حذف رنگزا مورد استفاده مجدد قرار گیرد.



شکل ۷: قابلیت استفاده مجدد کربن فعال در حذف رنگزای راکتیو بلو ۲۱.

Figure 7: Reusability of activated carbon in the removal of reactive blue 21 dye.

جدول ۵: عوامل مدل سینتیک شبه درجه اول، شبه درجه دوم و نفوذ

درون ذره ای برای جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ بر روی کربن فعال.

Table 5: Pseudo-first-order, Pseudo-second-order and Intraparticle diffusion kinetic model parameters for the adsorption of reactive blue 21 dye on activated carbon.

Kinetic model	Kinetic coefficients	Values
Pseudo-first-order	k_1 (1/min)	0.006
	q_e (mg/g)	1.073
	R^2	0.056
Pseudo-second-order	k_2 (g/mg min)	0.252
	q_e (mg/g)	2.425
	R^2	0.971
Intraparticle diffusion	k_{ip} (mg/g min ^{0.5})	0.386
	C (mg/g)	0.445
	R^2	0.836

۳-۸- قابلیت استفاده مجدد

قابلیت استفاده مجدد از جاذب در پنج چرخه جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ بررسی شد. پس از هر چرخه جذب، جاذب جدا شده با محلول

۳-۹- سازوکار جذب

بر اساس نتایج حاصل از تجزیه و تحلیل جاذب و آزمایشات فرایند جذب مشاهده شد سازوکار جذب به مشخصات جاذب از جمله ویژگی‌های سطحی، تخلخل، مکان‌های فعال روی سطح جاذب و ساختار مولکولی آلاینده بستگی دارد. برای بررسی تاثیر ساختار مولکولی و گروه‌های عاملی بر رفتار جذب، محاسبات DFT برای اندازه‌گیری پتانسیل الکترواستاتیک (ESP) رنگزای راکتیو بلو ۲۱ انجام شد. بدین منظور، ساختار مولکولی رنگزا با استفاده از نرم افزار GaussView 6.0 ترسیم و با نرم افزار Gaussian 09 و سطح تئوری B3LYP/6-311+G(d,p) بهینه شد. نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیک مولکولی در شناسایی مناطق هسته دوست و الکترون دوست درون یک مولکول که می‌تواند بر واکنش پذیری، پایداری و برهم‌کنش با دیگر گونه‌های مولکولی تأثیر گذارد، مفید است. همان‌طور که در شکل ۸a نشان داده شده است، نقشه ESP به صورت دیداری توزیع بار الکتریکی در سراسر سطح مولکول رنگزای راکتیو بلو ۲۱ را نشان می‌دهد. این نقشه مناطقی از پتانسیل الکترواستاتیک مثبت و منفی را نشان می‌دهند که به ترتیب مربوط به مناطق کمبود الکترون (آبی) و مناطق با چگالی بالای الکترون (قرمز) است.

تجزیه و تحلیل نقشه ESP رنگزای راکتیو بلو ۲۱، مناطقی با چگالی الکترونی بالا مرتبط با اتم‌های نیتروژن و حلقه‌های معطر را نشان می‌دهد که نشان‌دهنده مکان‌های بالقوه برای حمله الکترون دوست است. مناطق مثبت نشان دهنده تعامل قوی با هسته دوست‌ها است. در حالی اتم‌های گوگرد و برخی از اتم‌های کربن نواحی مشخصی از پتانسیل منفی را نشان می‌دهد که این بخش‌های مولکول مسئول حملات هسته دوست هستند و آن را به مکانی مناسب برای پیوند هیدروژنی و واکنش با گونه‌های دارای بار مثبت تبدیل می‌کند. این نتایج را می‌توان با مشاهده نقشه چگالی کل در HOMO و LUMO نیز مشاهده و تأیید کرد (شکل ۸ b, c).

چگالی الکترون هر دو سطح HOMO و LUMO به طور کلی در بخش مولکولی رنگزای راکتیو بلو ۲۱ متمرکز است، که نشان می‌دهد که یک انتقال بار به دلیل جابه‌جایی الکترون‌های π وجود دارد. این نتایج نشان می‌دهد که رنگزای راکتیو بلو ۲۱ دارای مناطق غنی از الکترون و فقیر الکترون متفاوت است، که باعث می‌شود حذف آن توسط کربن فعال مورد انتظار باشد.

شرایط pH نیز بر سازوکار جذب مولکول‌های رنگزای راکتیو بلو ۲۱ تأثیر می‌گذارد. تغییرات pH ممکن است بر نوع و شدت تعاملات جذب بین کربن فعال و رنگزا تأثیر گذارد. در pH اسیدی، جذب بیشتر ممکن است به دلیل تعاملات الکترواستاتیکی و تشکیل پیوندهای هیدروژنی باشد همچنین pH اسیدی باعث پروتون‌دار شدن سطح

جاذب و در نتیجه پیوند الکترواستاتیکی بین گروه‌های پروتون‌دار شده سطح جاذب و گروه‌های سولفونات با بار منفی (SO_3^-) مولکول‌های رنگزا راکتیو بلو ۲۱ می‌شود. نتایج پتانسیل زتا این نظریه را تأیید کرد. مقدار پتانسیل زتا کربن فعال، $+3/4$ میلی‌ولت بود که نشان دهنده پیوند الکترواستاتیک بین مولکول‌های آنیونی رنگزای راکتیو بلو ۲۱ و سطح جاذب است. طیف‌سنجی FTIR ثابت می‌کند که سطح کربن فعال حاوی گروه‌های عاملی مختلفی است که از مواد زیستی کربن (گروه‌های هیدروکسیل، کربونیل و اتر) است که گروه‌های هیدروکسیل در ساختار آن، هیدروژن فراوانی را برای تشکیل پیوندهای هیدروژنی بین اتم‌های نیتروژن و اکسیژن در ساختار رنگزای راکتیو بلو ۲۱ فراهم می‌کنند (۳۷، ۳۸). در نهایت، برهم‌کنش $\pi-\pi$ می‌تواند بین گروه‌های اهداکننده الکترون اکسیژن و هیدروژن روی سطح جاذب و گیرنده الکترون (سیستم π) در حلقه‌های آروماتیک رنگزای راکتیو بلو ۲۱ رخ دهد که نشان می‌دهد برهم‌کنش $\pi-\pi$ می‌تواند فرایند جذب را افزایش دهد (۳۹). بنابراین، سازوکارهای جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ بر روی کربن فعال را می‌توان واکنش الکترواستاتیک، پیوند هیدروژنی، برهم‌کنش‌های انباشتگی $\pi-\pi$ پیشنهاد کرد (شکل ۸d).

۳-۱۰- مقایسه مطالعه حاضر با مطالعات دیگر

در این مطالعه، کربن فعال تولیدشده از لیف خرما با ظرفیت جذب $13/054$ میلی‌گرم بر گرم، به عنوان یک جاذب طبیعی و اقتصادی در فرایند حذف رنگزای راکتیو بلو ۲۱ مورد استفاده قرار گرفت. این ظرفیت جذب نشان‌دهنده کارایی بالای جاذب طبیعی در مقایسه با سایر جاذب‌های مورد استفاده در مطالعات دیگر است که در جدول ۶ ارائه شده است. مقایسه این نتایج با داده‌های موجود در سایر مطالعات نشان می‌دهد که ظرفیت جذب جاذب کربن فعال تهیه‌شده از لیف خرما در این مطالعه، در سطح بالایی قرار دارد که این به دلیل ساختار سطحی متخلخل و مساحت سطح مناسب آن است.

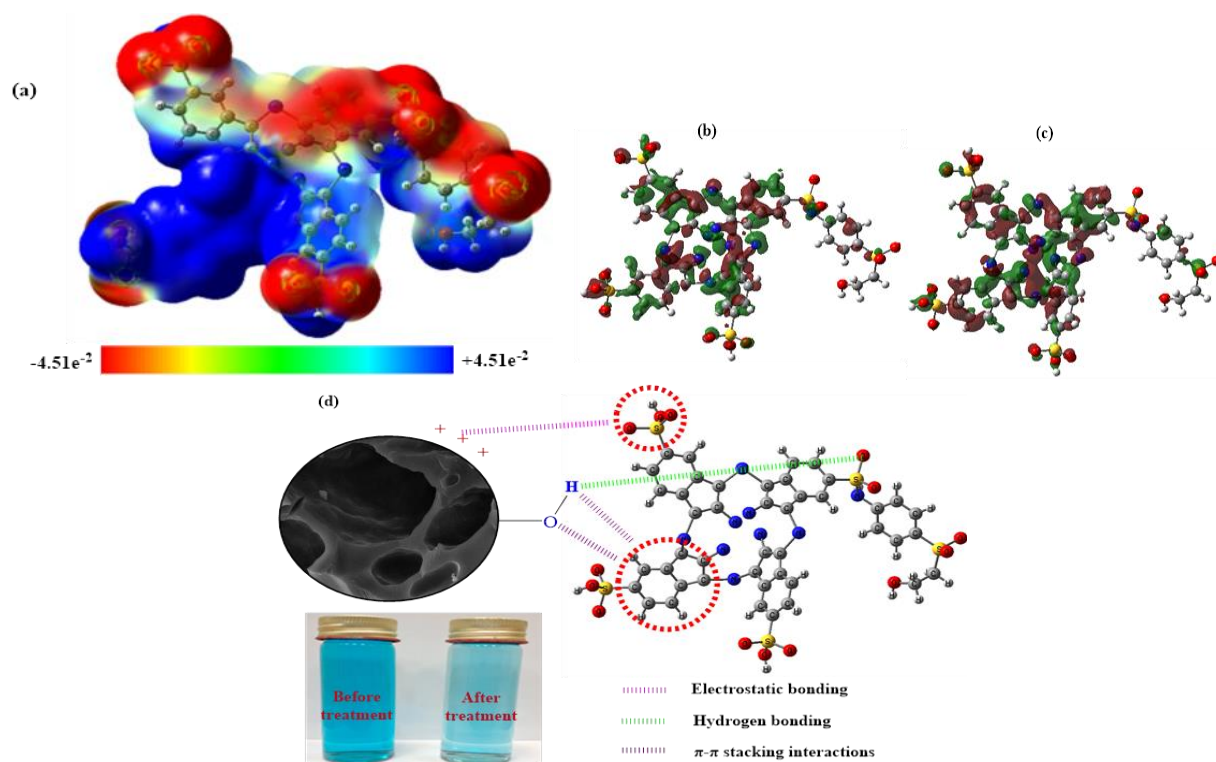
جدول ۶: مقایسه حذف رنگزای راکتیو بلو ۲۱ توسط جاذب‌های مختلف.

Table 6: Comparison of Reactive Blue 21 dye removal by different adsorbents.

Adsorbent type	Adsorption capacity (mg/g)	Ref.
Palm fiber activated carbon	13.054	This study
Natural zeolite	9.65	(40)
Polyurethane foam	8.31	(41)
TiO ₂	22.79	(42)
Acid-treated palm shell powder	24.866	(43)
Sesame stalk activated carbon	2.9	(14)

² Electrophilic

¹ Electrostatic Potential



شکل ۸: (a) نقشه‌های پتانسیل الکترواستاتیک مولکولی، (b) چگالی الکترون سطح HOMO، (c) چگالی الکترون سطح LUMO و (d) سازوکار فرایند جذب مولکول رنگزای راکتیو بلو ۲۱ بر روی کربن فعال.

Figure 7: (a) Molecular electrostatic potential maps, (b) HOMO surface electron density, (c) LUMO surface electron density, and (d) Mechanism of the adsorption process of reactive blue 21 dye molecule on activated carbon.

مشخص شد جذب رنگزای راکتیو بلو ۲۱ بر روی کربن فعال بر اساس پیوندهای الکترواستاتیک، هیدروژنی و انباشتگی π - π بود. بر اساس نتایج، کربن فعال تهیه شده از الیاف خرما از لحاظ کارآمدی پتانسیل بالایی برای استفاده جهت حذف رنگزای راکتیو از محیط آبی دارد.

تشکر و قدردانی

مقاله حاضر حاصل از طرح تحقیقاتی به شماره ۱۲۱۷۷ با کد اخلاق IR.SSU.REC.1400.231 دانشگاه علوم پزشکی شهید صدوقی یزد می‌باشد. بدین‌وسیله از حمایت‌های دانشگاه علوم پزشکی شهید صدوقی یزد تشکر می‌گردد.

تعارض منافع

هیچگونه تعارض منافع توسط نویسندگان بیان نشده است.

۴- نتیجه‌گیری

در این مطالعه کربن فعال از الیاف خرما به روش فعال‌سازی شیمیایی تهیه شد و برای حذف رنگزای راکتیو بلو ۲۱ از محیط آبی مورد استفاده قرار گرفت. خواص فیزیکی جاذب با استفاده از آزمون‌های XRD، FTIR، SEM و پتانسیل زتا بررسی شد که در آن تخلخل و منافذ کربن فعال به خوبی مشخص بود. از روش سطح پاسخ و طراحی باکس بنکن برای طراحی آزمایش و تعیین شرایط بهینه استفاده شد. در شرایط بهینه، زمان تماس ۳۰ دقیقه، مقدار جاذب ۳ گرم بر لیتر، غلظت رنگزا ۱۰ میلی‌گرم بر لیتر و pH برابر ۳، بازده حذف به $74/48$ درصد رسید. طبق نتایج داده‌ها از مدل سینتیک شبه درجه دوم و ایزوترم لانگمویر تبعیت می‌کرد و جذب یک لایه و یکنواخت رنگزا روی جاذب را نشان داد. سازوکار فرایند جذب با استفاده از تئوری DFT و آزمون مشخصات جاذب مورد بحث و بررسی قرار گرفت و

۵- مراجع

- Kurnia M, Suprpto S, Ni'mah YL. Bio-adsorbent for remazol brilliant blue r (rbbr) dye. *S Afr J Chem Eng.* 2024;47(1):111-122. <https://doi.org/10.1016/j.sajce.2023.11.002>.
- Nwanekezie MN, Ogbeide SE, Chidiebere NC, Sebe GO. Optimizing methylene blue removal from textile effluents: comparative study of adsorption efficiency using raw and activated carbon derived from gmelina wood wastes. *Am. J. Anal. Chem.* 2023;14(9):362-77. <https://doi.org/10.4236/ajac.2023.149020>.
- Altıntig E, Ates A, Angin D, Topal Z, Aydemir Z. Kinetic, equilibrium, adsorption mechanisms of RBBR and MG dyes on chitosan-coated montmorillonite with an ecofriendly approach. *Chem Eng Res Des.* 2022;188:287-300. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2022.09.015>.
- Paluch D, Bazan-Wozniak A, Nosal-Wiercińska A, Pietrzak R. Removal of methylene blue and methyl red from aqueous solutions using activated carbons obtained by chemical activation of caraway seed. *Mol.* 2023 ;28(17):6306. <https://doi.org/10.3390/molecules28176306>.
- Zaidi Z, Manchanda A, Sharma A, Choudhry A, Sajid M, Khan SA, et al. Adsorptive removal of methylene blue using fruit waste activated carbon and its binary metal oxide nanocomposite. *Chem Eng J Adv.* 2023:100571. <https://doi.org/10.1016/j.ceja.2023.100571>.
- Amouei A, Asgharnia H, Karimian K, Mahdavi Y, Balarak D, Ghasemi S. Optimization of dye reactive orange 16 (RO16) adsorption by modified sunflower stem using response surface method from aqueous solutions. *J Rafsanjan Univ Med Sci.* 2016;14(10):813-26. <https://dor.isc.ac/dor/20.1001.1.17353165.1394.14.10.2.8>.
- Alidoust S, Bahramifar N, Younesi H. Optimizing the removal of Reactive Blue 21 using non-metallic carbon nitride photocatalyst by Response Surface Methodology. *JNE.* 2022 (Articles in Press). <http://doi.org/10.22059/jne.2022.341918.2428>.
- Chaharkam M, Tahmasebpour M, Sari Yilmaz M. Investigating the performance of activated carbon adsorbent modified with iron oxide nanoparticles in removing crystal violet from water. *J Color Sci Tec.* 2024;17(4):303-24. <https://dor.isc.ac/dor/20.1001.1.17358779.1402.17.4.3.8>.
- Benjelloun M, Miyah Y, Evrendilek GA, Zerrouf F, Lairini S. Recent advances in adsorption kinetic models: their application to dye types. *Arab J Chem.* 2021; 14(4):103031. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2021.103031>.
- Doan L, Nguyen TMD, Le TM, Huynh KG, Quach TPT. surface modifications of superparamagnetic iron oxide nanoparticles with polyvinyl alcohol, chitosan, and activated carbon or graphite as methylene blue adsorbents—comparative study. *Coat J.* 2023;13(10):1797. <https://doi.org/10.3390/coatings13101797>.
- Tran TKN, Dang NK, Doan VD, Tran VA, Vasseghian Y, Aminabhavi TM. Mn₃O₄/activated carbon nanocomposites for adsorptive removal of methylene blue. *J Chem Eng.* 2023;474:145903. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.145903>.
- Somsiripan T, Sangwichien C. Enhancement of adsorption capacity of Methylene blue, Malachite green, and Rhodamine B onto KOH activated carbon derived from oil palm empty fruit bunches. *Arab J Chem.* 2023;16(12): 105270. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2023.105270>.
- Thitame P, Shukla S. Adsorptive removal of reactive dyes from aqueous solution using activated carbon synthesized from waste biomass materials. *Int J Environ Sci Technol.* 2016;13:561-70. <http://dx.doi.org/10.1007/s13762-015-0901-3>.
- Tela TB, Asgedom AG, Yihdego HT. Removal of reactive blue 21 from aqueous solution using activated and non-activated carbon prepared from agricultural by-products. *Chem Afr.* 2025:1-10. <https://doi.org/10.1007/s42250-025-01236-w>.
- Saleem J, Moghal ZKB, Pradhan S, McKay G. High-performance activated carbon from coconut shells for dye removal: study of isotherm and thermodynamics. *RSC Adv.* 2024;14(46):33797-808. <https://doi.org/10.1039/D4R A06287F>.
- Husain A, Ansari K, Mahajan DK, Kandasamy M, Ansari M, Giri J, et al. Harnessing sustainable N-doped activated carbon from walnut shells for advanced all-solid-state supercapacitors and targeted Rhodamine B dye adsorption. *J Sci Adv Mater Devices.* 2024;9(2):100699. <https://doi.org/10.1016/j.jsamd.2024.100699>.
- Pormazar SM, Dalvand A. Adsorption of Direct Red 23 dye from aqueous solution by means of modified montmorillonite nanoclay as a superadsorbent: mechanism, kinetic and isotherm studies. *Korean J chem eng.* 2020;37:2192-201. <https://doi.org/10.1007/s11814-020-0629-8>.
- Mahvi AH, Dalvand A. Kinetic and equilibrium studies on the adsorption of Direct Red 23 dye from aqueous solution using montmorillonite nanoclay. *Water Qual Res J.* 2020;55(2):132-44. <https://doi.org/10.2166/wqrj.2019.008>.
- Fallahzadeh RA, Mahvi AH, Meybodi MN, Ghaneian MT, Dalvand A, Salmani MH, et al. Application of photo-electro oxidation process for amoxicillin removal from aqueous solution: Modeling and toxicity evaluation. *Korean J Chem Eng.* 2019;36:713-21. <https://doi.org/10.1007/s11814-019-0259-1>.
- Bhardwaj B, Kumar R, Singh PK. An improved surface roughness prediction model using Box-Cox transformation with RSM in end milling of EN 353. *J Mech Sci Technol.* 2014;28:5149-57. <https://doi.org/10.1007/s12206-014-0837-4>.
- Zarei H, Nasseri S, Nabizadeh R, Shemirani F, Dalvand A, Mahvi AH. Modeling of arsenic removal from aqueous solution by means of MWCNT/alumina nanocomposite. *Desalin Water Treat.* 2017;67:196-205. <https://doi.org/10.5004/dwt.2017.20402>.
- Pormazar SM, Ehrampoush MH, Ghaneian MT, Khoobi M, Talebi P, Dalvand A. Application of amine-functioned Fe₃O₄ nanoparticles with HPEI for effective humic acid removal from aqueous solution: modeling and optimization. *Korean J Chem Eng.* 2020;37:93-104. <https://doi.org/10.1007/s11814-019-0411-y>.
- Choi M-Y, Kang J-K, Lee CG, Park SJ. Feasibility of fluoride removal using calcined Mactra veneriformis shells: Adsorption mechanism and optimization study using RSM and ANN. *Chem Eng Res Des.* 2022;188:1042-53. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2022.10.031>.
- Azzouni D, Baragh F, Mahmoud AM, Alanazi MM, Rais Z, Taleb M. Optimization of methylene blue removal from aqueous solutions using activated carbon derived from coffee ground pyrolysis: A response surface methodology

- (RSM) approach for natural and cost-effective adsorption. *J Saudi Chem Soc.* 2023;27(5):101695. <https://doi.org/10.1016/j.jscs.2023.101695>.
25. Chouaybi I, Ouassif H, Bettach M, Moujahid EM. Fast and high removal of acid red 97 dye from aqueous solution by adsorption onto a synthetic hydrocalumite: Structural characterization and retention mechanisms. *Inorg Chem. Commun.* 2022;146:110169. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2022.110169>.
 26. Hua Y, Xu D, Liu Z, Zhou J, Han J, Lin Z, et al. Effective adsorption and removal of malachite green and Pb^{2+} from aqueous samples and fruit juices by pollen-inspired magnetic hydroxyapatite nanoparticles/hydrogel beads. *J Clean Prod.* 2023;411:137233. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2023.137233>.
 27. Mohammed BB, Hsini A, Abdellaoui Y, Abou Oualid H, Laabd M, El Ouardi M, et al. Fe-ZSM-5 zeolite for efficient removal of basic Fuchsin dye from aqueous solutions: Synthesis, characterization and adsorption process optimization using BBD-RSM modeling. *J. Environ. Chem. Eng.* 2020;8(5):104419. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.104419>.
 28. Muslim M, Ali A, Neogi I, Dege N, Shahid M, Ahmad M. Facile synthesis, topological study, and adsorption properties of a novel Co (II)-based coordination polymer for adsorptive removal of methylene blue and methyl orange dyes. *Polyhedron.* 2021;210:115519. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115519>.
 29. Bhomick P, Supong A, Baruah M, Pongener C, Gogoi C, Sinha D. Alizarin Red S adsorption onto biomass-based activated carbon: optimization of adsorption process parameters using Taguchi experimental design. *Int J Environ Sci Technol.* 2020;17(2):1137-48. <https://doi.org/10.1007/s13762-019-02389-1>.
 30. Kurnia KA, Rahayu AP, Islami AF, Kusumawati Y, Wenten IG, Rahmah AU, et al. Insight into the adsorption of dyes onto chitin in aqueous solution: An experimental and computational study. *Arab J Chem.* 2022 ;15(11):104293. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2022.104293>.
 31. Mittal H, Al Alili A, Morajkar PP, Alhassan SM. Graphene oxide crosslinked hydrogel nanocomposites of xanthan gum for the adsorption of crystal violet dye. *J Mol Liq.* 2021;323:115034. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.115034>.
 32. Radaei E, Alavi Moghaddam MR, Arami M. Removal of reactive blue 19 from aqueous solution by pomegranate residual-based activated carbon: optimization by response surface methodology. *J Environ Health Sci Eng.* 2014;12:1-8. <https://doi.org/10.1186/2052-336X-12-65>.
 33. Wen Z, Peng R, Gao D, Lin J, Zeng J, Li Z, et al. Chitosan-alginate sponge with multiple cross-linking networks for adsorption of anionic dyes: Preparation, property evaluation, mechanism exploration, and application. *J Chromatogr A.* 2024;1713:464507. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2023.464507>.
 34. Kumar D, Gupta SK. Green synthesis of novel biochar from *Abelmoschus esculentus* seeds for direct blue 86 dye removal: Characterization, RSM optimization, isotherms, kinetics, and fixed bed column studies. *Environ Pollut.* 2023;337:122559. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2023.122559>.
 35. Wang L. Application of activated carbon derived from 'waste' bamboo culms for the adsorption of azo disperse dye: Kinetic, equilibrium and thermodynamic studies. *J Environ. Manage.* 2012;102:79-87. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2012.02.019>.
 36. Dehghan Banadaki M, Dalvand A, Pormazar SM, Teimouri F, Shiri-Yekta Z. Feasibility and recyclability study of magnetic activated carbon derived from palm tree fibres (AC/Fe₃O₄) in thorium (IV) removal from aqueous solution. *Int J Environ Anal Chem.* 2024;1-18. <https://doi.org/10.1080/03067319.2024.2349797>.
 37. Karyab H, Ghasemi M, Ghotbinia F, Nazeri N. Efficiency of chitosan nanoparticle with polyaluminum chloride in dye removal from aqueous solutions: optimization through response surface methodology (RSM) and central composite design (CCD). *Int J Biol Macromol.* 2023; 249:125977. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2023.125977>.
 38. Pérez-Millán T, Mendoza-Castillo D, Aguayo-Villarreal I, Rojas-Mayorga C, Villanueva-Mejía F, Bonilla-Petriciolet A. Application of DFT and Response Surface Models to analyze the adsorption process of basic blue 3 and reactive blue 19 dyes on sugarcane bagasse and coconut endocarp biomass. *J Mol Struct* 2023;1287:135658. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.135658>.
 39. Patra T, Mohanty A, Singh L, Muduli S, Parhi PK, Sahoo TR. Effect of calcination temperature on morphology and phase transformation of MnO₂ nanoparticles: A step towards green synthesis for reactive dye adsorption. *Chemosphere.* 2022;288:132472. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.132472>.
 40. Sismanoglu T, Kismir Y, Karakus S. Single and binary adsorption of reactive dyes from aqueous solutions onto clinoptilolite. *J Hazard Mater.* 2010;184(1-3):164-9. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2010.08.019>.
 41. da Silveira Neta JdJ, Moreira GC, da Silva CJ, Reis C, Reis EL. Use of polyurethane foams for the removal of the Direct Red 80 and Reactive Blue 21 dyes in aqueous medium. *Desalin.* 2011;281:55-60. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2011.07.041>.
 42. Srivastava P, Goyal S, Tayade R. Ultrasound-assisted adsorption of reactive blue 21 dye on TiO₂ in the presence of some rare earths (La, Ce, Pr & Gd). *Can J Chem Eng.* 2014;92(1):41-51. <https://doi.org/10.1002/cjce.21799>.
 43. Sreelatha G, Ageetha V, Parmar J, Padmaja P. Equilibrium and kinetic studies on reactive dye adsorption using palm shell powder (an agrowaste) and chitosan. *J Chem Eng. Data.* 2011;56(1):35-42. <https://doi.org/10.1021/je1007263>.

How to cite this article:

Dehghan Dehnavi E, Mahmoudi Sh, Pormazar SM, Dalvand A. Investigation of the adsorption process of reactive blue 21 dye on activated carbon produced from palm tree fibers. *J Stud Color World.* 2025;15(3):297-311. <https://doi.org/10.30509/jscw.2025.167519.1229> [In Persian].