

مطالعه نظری اثر سطح نانو ذره گرافنی بر حذف آلوده کننده های دارویی آب به روش محاسباتی

شبکه عصبی

غزاله عسکری نائینی^۱، فرهاد خامچین مقدم^۲

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی عمران، مهندسی آب و سازه های هیدرولیکی، دانشگاه آزاد اسلامی، مشهد، ایران

۲- دکترای تخصصی عمران آب، استادیار گروه عمران، واحد مشهد، دانشگاه آزاد اسلامی، مشهد، ایران

چکیده

آلودگی آب و پساب یکی از بحران های مهمی است که با، افزایش روزافزون جمعیت، توسعه صنایع و افزایش آلودگی با آن رو به رو هستیم. صنایع دارویی مقدار قابل توجهی فاضلاب های آلوده حاوی دارو را تولید میکند. داروها به دلیل داشتن خاصیت هایی همچون ضد میکروبی بودن، مانع فعالیت باکتری ها در سیستم تصفیه بیولوژیکی شده و با مختل کردن عملیات تصفیه بدون حذف شدن از آن عبور میکنند. بنابراین روشهای معمول مورد استفاده در تصفیه فاضلاب صنایع دارویی مانند تصفیه بیولوژیکی عموماً کارآمد نمیباشند. فناوری نانو فرصت هایی را برای توسعه فرایند های تصفیه آب و فاضلاب با هزینه های کم و اثر بخشی بالا و سازگار با محیط فراهم کرده است. با استفاده از فناوری نانو بسیاری از آلودگی های آبی مقاوم در تصفیه مانند آلودگی های دارویی آب و آلاینده هایی که به روش های سنتی قادر به تصفیه آنها نمی باشیم، می توانند مورد بررسی بیشتر قرار گیرند و نتایج قابل توجهی را پدید بیاورند. این مطالعه از نوع محاسباتی بوده. ما در این پژوهش با استفاده از سطح نانو گرافن به بررسی حذف ۶ ماده آلوده کننده دارویی (دیازپام - لیندال - فنوباریتال - فنی توتین - تئوفیلین - دیورون) با استفاده از روش سیستم شبکه عصبی هوشمند، سیستم استنتاج فازی، برمبنای تطبیق و نرم افزار های کاربردی (نرم افزار کم آفیس، نرم افزار اوپن بابل، نرم افزار گوسین و گوسین ویوو، نرم افزار multiwfn و نرم افزار متلب) موجود پرداختیم. با مدل سازی و آنالیز ترکیبات پارامترهای مولکولی مواد (سطح، حجم، دوقطبی اصلی و اوربیتال های مولکولی) محاسبه شدند و با حالات مختلف (غیاب و حضور نانو گرافن ها و ابعاد مختلف گرافن) مورد مقایسه قرار گرفتند. مقدار خطای آزمون برای پارامتر سطح در دسترس قطبی در ۵ جدول و مقدار خطای آزمون برای پارامتر حجم در ۳ جدول از سایر پارامترها کمتر است که به این معنی است که آلاینده های ترکیبات مورد مطالعه این پارامترها از سایر پارامترهای مولکولی، نقش بیشتری دارد. پارامترهای حجم و دوقطبی اصلی از سایر پارامترهای مورد مطالعه در حضور و عدم حضور نانو گرافن های کربنی با در نظر گرفتن شرایط مختلف تاثیر بیشتری در آلاینده های آب دارند.

واژه های کلیدی: نانو گرافن، تصفیه پساب، شبکه عصبی، آلودگی دارویی آب