

مطالعه رفتار یون های فلزی کادمیوم (Cd^{2+})، سرب (Pb^{2+}) و نیکل (Ni^{2+}) محلول در آب بکمک شبیه سازی دینامیک مولکولی

امیر رضا انصاری دزفولی^۱، مظفر علی مهراپیان^{۲*}، حسن هاشمی پور^۳

۱. دانشگاه شهید باهنر کرمان، بخش مهندسی مکانیک (kadr_basteh@yahoo.com)

۲. دانشگاه شهید باهنر کرمان، بخش مهندسی مکانیک (ma_mehrabian@uk.ac.ir)

۳. دانشگاه شهید باهنر کرمان، بخش مهندسی شیمی (hashemipur@uk.ac.ir)

چکیده

در مقاله حاضر خصوصیات مختلف محلول آب و یون های فلزی مانند سرعت یونها، نحوه آرایش مولکولهای آب حول یون فلزی و زمان شرکت مولکول های آب در لایه تشکیل شده حول یون فلزی به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی گردید. نتایج این تحقیق تشکیل یک آرایش پوسته مانند از مولکول های آب در اطراف یون های فلزی و تشکیل کمپلکس $M(H_2O)$ را نشان می دهد. تعداد مولکول های آب در این آرایش پوسته ای برای یونهای سرب، نیکل و کادمیوم بترتیب ۸، ۸/۴ و ۷ می باشد. مولکول های آب مجاور یون های سرب، نیکل و کادمیوم به ترتیب ۱۶۲، ۱۶۱/۵ و ۱۷۹ پیکو ثانیه در ناحیه پوسته مانند قرار دارند. همچنین مشاهده گردید که پایداری کمپلکس های $M(H_2O)$ برای کادمیوم بیشتر از نیکل، و برای نیکل بیشتر از سرب می باشد.

مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:

دریافت: ۱۸ مهر ۹۰

دریافت پس از اصلاح: ۲۶ تیر ۹۱

پذیرش نهایی: ۳۱ تیر ۹۱

کلمات کلیدی:

یون های فلزی سنگین

شبیه سازی

دینامیک مولکولی

۱- مقدمه

انجام شده است. همچنین تاثیر خصوصیات محلول یون فلزی و آب در فرایند جذب کمتر مورد توجه قرار گرفته است. لی و همکاران [۲۱] رفتار یون های فلزی قلیائی^{۲۱} محلول در آب را بکمک شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی نمودند. نتایج آنها نشان داد که مولکول های آب حول یون فلزی یک ساختار پوسته ای مانند تشکیل می دهند. آنها دریافتند که تعداد مولکول های آب شرکت کننده در لایه اول حول یون های فلزی لیتیم، سدیم، پتاسیم، روبیدیوم و سزیم به ترتیب ۶، ۶، ۸، ۸، ۹ و ۱۰ می باشد. برودسکایا و همکاران [۲۲] رفتار برخی یون های تک ظرفیتی محلول در آب مانند پتاسیم، سدیم، کلر و نقره را بکمک روش دینامیک مولکولی بررسی نمودند. یکی از پارامتر هایی که تاثیر آن بر روی رفتار یون های محلول بررسی شد، دما بود. تحقیقات نشان داد که با بالا رفتن دما تعداد مولکول های تشکیل دهنده پوسته اول کم می شود. بررسی های آنها همچنین نشان داد که تعداد مولکول های آب حول یون های مثبت بیشتر از یون های منفی می باشد. وو و همکاران [۲۳] رفتار یون های دو ظرفیتی روی، منیزیم و کلسیم محلول در آب را بکمک شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی نمودند. نتایج شبیه سازی آنها نیز نشان از تشکیل یک وضعیت پوسته مانند از مولکول های آب حول یون فلزی داشت. تعداد مولکول های آب تشکیل دهنده لایه اول حول یون های فلزی روی، منیزیم و کلسیم به ترتیب ۶، ۶ و ۷،۳ بود. آنها نشان دادند که حداکثر فاصله مولکولهای آب تشکیل شده حول یون های فلزی روی، منیزیم و کلسیم بترتیب ۲،۱،۲ و ۲،۲ و ۳،۲ آنگستروم می باشد.

در تحقیق حاضر با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، رفتار یون های فلزی سنگین کادمیوم^{۲۲}، سرب^{۲۳} و نیکل^{۲۴} محلول در آب بررسی می شود. یون های کادمیوم و سرب از این جهت انتخاب شده اند که کمترین و بیشترین میزان جذب توسط جاذب های کربنی متعلق به این دو یون می باشد. همچنین به منظور انجام مقایسه، خواص محلول دارای یون نیکل نیز بررسی خواهد شد. بر اساس تحقیقات انجام شده یون نیکل دارای میزان جذب کمتری نسبت به یون سرب و دارای میزان جذب بیشتری نسبت به یون کادمیوم بر روی جاذب های کربنی می باشد [۱۴-۲۰].

سالهاست که وجود یونهای فلزی سنگین مانند سرب، جیوه، مس، روی، نیکل و کادمیوم در آبهای آلوده و پساب های صنعتی به علت اثرات سمی آنها بر روی انواع گونه های زیستی (گیاهان، آبزیان، حیوانات و انسانها)، توجه دانشمندان را به خود جلب کرده است. متأسفانه این نوع آلودگی برخلاف آلودگیهای ارگانیک به مرور زمان از بین نمی رود و تجمع یونهای فلزی سنگین به یک مسئله مهم زیست محیطی تبدیل شده است که با پیشرفت صنایع روز به روز بر وسعت آن افزوده می شود [۱]. تقریباً اکثر کارخانه ها (شیمیائی، باتری سازی و رنگ سازی)، صنایع سنگین و معادن، تولید کننده حجم وسیعی از آب های آلوده به یونهای فلزی سنگین می باشند. امروزه روشهای مختلفی مانند روش تعویض یونی، روش تبخیری، روش ته نشینی شیمیائی، روش غشای اسمزی، روش الکترولیز و روش جذبی به منظور جداسازی یونهای فلزی سنگین مورد استفاده قرار می گیرند. از دیدگاه اقتصادی و بهره وری، روش جذبی به علت احیای مجدد مواد جاذب و بازده بسیار بالا یکی از راه های موثر و اقتصادی در جداسازی یونهای فلزی سنگین از آب می باشد [۲]. امروزه جاذب های مختلفی مانند کربن فعال^{۱۲} [۳،۴]، پسماند زغال سنگ^{۱۳} [۵،۶]، پیت^{۱۴} [۷]، لجن فاضلاب^{۱۵} [۸]، زئولیت^{۱۶} [۹]، مواد زیستی^{۱۷} [۱۰،۱۱]، رزین^{۱۸} [۱۲] و همچنین نانو لوله کربنی^{۱۹} [۱۳] در جذب و جداسازی یون های فلزی سنگین از آب به کار می روند. نتایج تحقیقات تجربی انجام شده در مورد جذب یون های فلزی سنگین محلول در آب نشان میدهد که برای جاذب های کربنی میزان جذب یون های فلزی از الگوی $Cd^{2+} > Cu^{2+} > Zn^{2+} > Ni^{2+} > Pb^{2+}$ پیروی می کند [۱۴-۲۰]. اگر چه بکمک نتایج تجربی، پارامتر های موثر در فرایند جذب مانند دما، pH محلول، میزان جاذب، غلظت محلول، مشخصات سطحی جاذب (پتانسیل زتا^{۲۰}) و گروه های عامل مورد بررسی قرار گرفته اند [۱۴-۲۰] اما به علت انجام فرایند جذب یون های فلزی در مقیاس زمانی و هندسی بسیار کوچک، تاکنون تحقیقات عددی و تحلیلی کمی در این زمینه

^{۱۱} Active carbon^{۱۲} Fly ash^{۱۳} Peat^{۱۴} Sewage sludge ash^{۱۵} Zeolite^{۱۶} Biomaterials^{۱۷} Resins^{۱۸} Carbon nanotubes^{۱۹} Zeta potential^{۲۱} Alkali metal cation^{۲۲} Cd²⁺^{۲۳} Pb²⁺^{۲۴} Ni²⁺

۲- مدلسازی فرایند

یک برنامه کامپیوتری به منظور شبیه سازی محلول آب و یون های فلزی سرب، نیکل و کادمیوم در محیط فورترن با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی تدوین گردید. تمامی مولکول های آب و یون های فلزی بصورت جسم صلب در نظر گرفته شدند. در مولکول آب، طول پیوند O-H برابر ۱Å و زاویه بین اتمهای H-O-H معادل ۱۰۹/۵ در نظر گرفته شد [۲۴]. همچنین بارهای الکترواستاتیکی اتم اکسیژن و اتم های هیدروژن در مرکز این اتمها در نظر گرفته شد.

تابع پتانسیل کلی برای شبیه سازی بر همکنش مولکول های آب و آب و برهمکنش مولکول های آب و یون های فلزی بصورت زیر در نظر گرفته شده است [۲۴]:

$$U_{Tot} = U(r_{ij}) = U_{vdW} + U_q \quad (1)$$

$$= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

در معادله فوق ϵ_{ij} عمق موثر^{۲۵} (حداکثر انرژی جاذبه بین دو اتم)، σ قطر^{۲۶} اتم، ϵ_0 ثابت دی الکتریک، q مقدار بار الکترواستاتیکی اتم و r_{ij} فاصله بین دو اتم i و j (و i و j شماره اتم) می باشد. کلیه پارامتر های بکار رفته در مدل سازی انرژی پتانسیل کلی سیستم، در جدول ۱ آورده شده اند.

جدول (۱) پارامتر های مورد استفاده در مدلسازی انرژی پتانسیل مولکول های آب و یون های فلزی.

نام اتم	بار الکترواستاتیکی [e ^{۲۷}]	ϵ_{ij} [kcal/mol]	σ [Å]
اکسیژن [۲۴]	-۰٫۸۲	٫۱۵۰	۳٫۱۶۶
هیدروژن [۲۴]	+۰٫۴۱	۰	۰
سرب [۲۵]	+۲	۰٫۱۱۷	۳٫۸۶۴
کادمیوم [۲۵]	+۲	۰٫۱۱۷	۳٫۱۰۱۱
نیکل ^a	+۲	۰٫۰۲	۳٫۸۵

^amm2 force field

در محاسبه تابع پتانسیل لئونارد-جونز بین اتمهای غیر متشابه، از قانون ترکیب لورنز-برثلت^{۲۸} استفاده شده است. قانون ترکیب لورنز-برثلت بصورت زیر بیان می شود [۲۴]:

$$\epsilon_{ij} = (\epsilon_{ii} \cdot \epsilon_{jj})^{\frac{1}{2}}, \sigma_{ij} = \frac{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}}{2} \quad (2)$$

همچنین فاصله قطع توابع پتانسیل^{۲۹} برای هر اتم ۹Å در نظر گرفته شده است.

محلول آب دارای یون فلزی کادمیوم، نیکل یا سرب، بصورت سیستمی متشکل از ۲۱۵ مولکول آب و یک یون فلزی در دمای ۲۹۸ درجه کلون در نظر گرفته شده است. همچنین شبیه سازی در رسته NVT انجام شده است. در تمامی مدت اجرا، دمای سیستم بکمک روش وودکاک [۲۶] ثابت نگه داشته شد. در این روش در هر بازه زمانی، سرعت مولکول ها در پارامتر λ ضرب می شود. پارامتر λ بصورت زیر تعریف می شود.

$$\lambda = \frac{T}{T_{curr}} \quad (3)$$

در معادله فوق T دمای مورد نظر برای شبیه سازی سیستم و T_{curr} دمای سیستم در هر بازه زمانی می باشد. در هر بازه زمانی دمای سیستم با انرژی جنبشی رابطه مستقیم داشته و مطابق رابطه زیر تعریف می شود [۲۷].

$$K_{Tot} = \frac{6Nk_bT}{2} \quad (4)$$

به منظور به تعادل رسیدن سیستم^{۳۰} ابتدا کد در 10^5 بازه زمانی^{۳۱} اجرا گردید. بعد از رسیدن سیستم به حالت تعادل، جهت استخراج نتایج^{۳۲} کد در 10^5 بازه زمانی دیگر نیز اجرا گردید. تمامی خواص فیزیکی و دینامیکی بعد از رسیدن سیستم به تعادل محاسبه و یا استخراج شده اند. مشخصات کلی سیستم شبیه سازی شده (محلول آب و یون های فلزی) در جدول ۲ آورده شده است. ابعاد سیستم بر اساس فضای اشغالی توسط ۲۱۶ مولکول آب در چگالی ۱۰۰۰ کیلوگرم بر متر مکعب و دمای ۲۹۸ کلون در نظر گرفته شده است که این مقدار برابر با ۲۹٫۹۹ آنگستروم مکعب برای هر مولکول آب می باشد.

^{۲۸}Lorentz-Berthelot

^{۲۹}Cut off

^{۳۰}Equilibration

^{۳۱}Time step

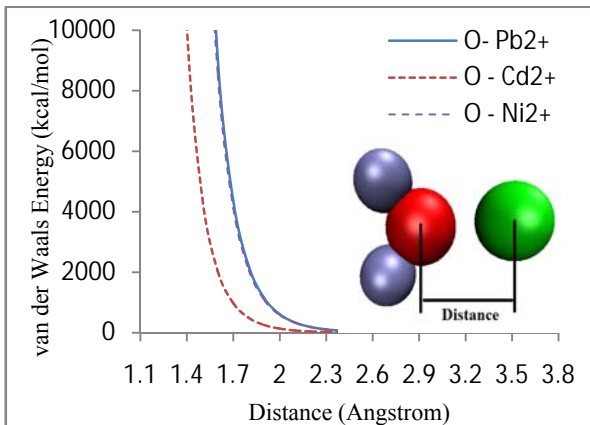
^{۳۲}Data production

^{۲۵}Well depth

^{۲۶}Diameter

^{۲۷}Charge of electron $e=1.60219 \times 10^{-19}$ C

واندروالس بین یک مولکول آب و یون های فلزی سرب، نیکل و کادمیوم بر حسب فاصله بین آنها، رسم شده است. با توجه به شکل ۱ می توان دریافت که فاصله تعادلی بین مولکول های آب و یون کادمیوم کوچکتر از فاصله تعادلی بین مولکول های آب و دو یون فلزی دیگر خواهد بود، زیرا مینیمم انرژی واندروالس در فاصله کمتری از مرکز یون کادمیوم قرار دارد.



شکل (۱) تغییرات انرژی پتانسیل واندروالس بین مولکول آب و یون های فلزی سرب، نیکل و کادمیوم.

شکل ۲، نسبت تعداد مولکول های آب در فاصله r_p به سطح یک کره فرضی با شعاع r_p و مرکزیت یون فلزی را نشان می دهد. مقدار این نسبت که با تابع J نشان داده شده است، از رابطه زیر بدست می آید:

$$J(r_p) = 0.1 \left(\frac{n_r}{4\pi r_p^2} \right) \quad (5)$$

$$r_p = \frac{r_1 + r_2}{2}$$

نتیجه مهمی که از شکل ۲ بدست می آید، تشکیل یک وضعیت پوسته ای^{۳۴} شکل از مولکول های آب اطراف یون های فلزی سرب، نیکل و کادمیوم می باشد. در شکل ۲، فاصله لایه های بعدی مولکول های آب از لایه اول بخوبی قابل مشاهده می باشد. تقریباً در هر سه سیستم متشکل از یون های سرب، نیکل و کادمیوم، مولکول های پوسته اول با مولکول های پوسته بعدی حدود ۲ آنگستروم فاصله دارند. متوسط تعداد مولکول های شرکت کننده در پوسته اول اطراف یون های فلزی سرب، نیکل و کادمیوم و همچنین متوسط فاصله آنها از مرکز این یونها در جدول ۴ آورده شده است. آرایش مولکول های پوسته اول اطراف یون های فلزی کادمیوم، نیکل و سرب در شکل ۳ نشان داده شده است.

جدول (۲) مشخصات کلی محلول شبیه سازی شده آب- یون فلزی.

پارامتر	واحد	مقدار
دمای سیستم	K	۲۹۸
چگالی آب	g/cc	۰/۹۹۷
تعداد مولکول آب	-	۲۱۵
تعداد یون فلزی	-	۱
ابعاد سیستم	-	۱۸,۶۴۳
شرط مرزی	تمامی جهات	شرط مرزی تناوبی ^{۳۳}

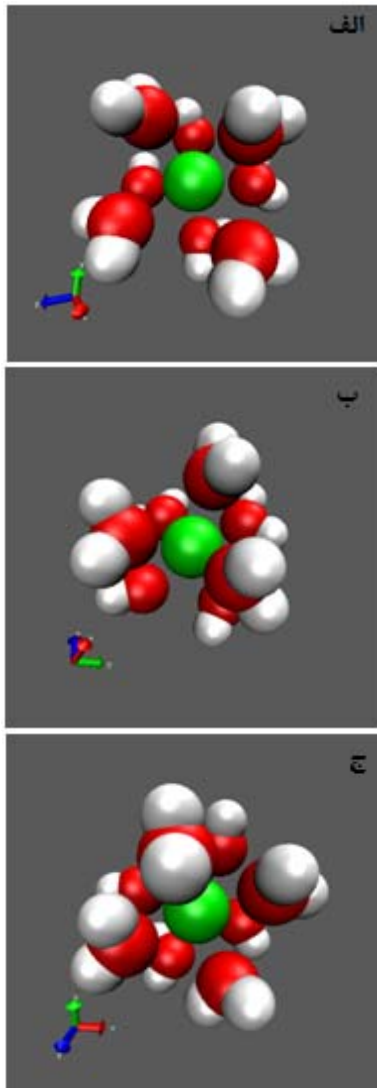
۳- نتایج

به منظور اعتبار سنجی نتایج، میزان انرژی پتانسیل سیستم آب- یون های فلزی با مقادیر موجود در دیگر تحقیقات در جدول ۳ مقایسه شده است.

جدول (۳) انرژی پتانسیل کل سیستم آب- یون فلزی.

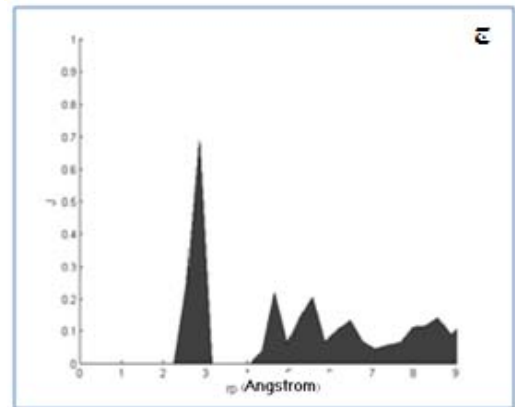
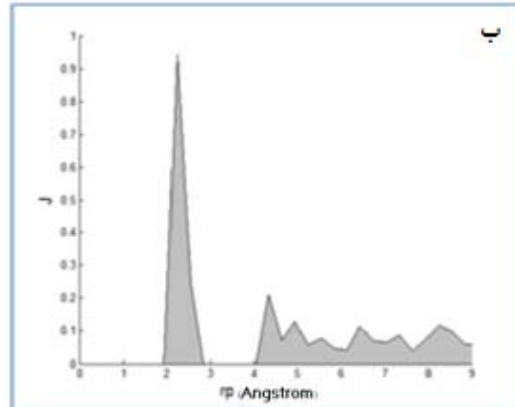
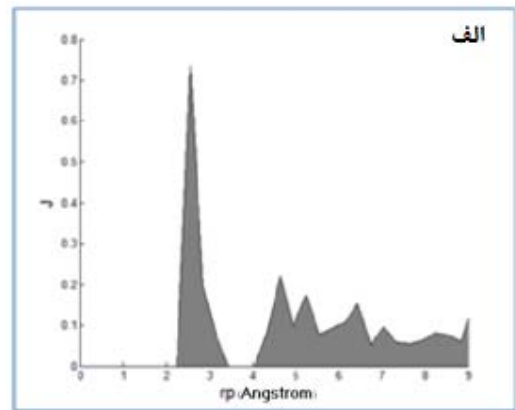
سیستم	انرژی پتانسیل [kcal/mol]	تعداد مولکول آب	تعداد یون
آب [۲۵]	-۱۹۶۵,۰	۲۱۶	۰
آب- یون فلزی سرب [۲۵]	-۲۳۳۸,۴	۲۱۶	۱
آب- یون فلزی کادمیوم [۲۵]	-۲۲۹۰,۳	۲۱۶	۱
آب- یون فلزی سرب (تحقیق حاضر)	-۲۱۹۸,۹	۲۱۵	۱
آب- یون فلزی کادمیوم (تحقیق حاضر)	-۲۰۶۹,۶	۲۱۵	۱
آب- یون فلزی نیکل (تحقیق حاضر)	-۲۱۸۵,۷	۲۱۵	۱

با توجه به رابطه ۱، نیروی الکترواستاتیکی بین مولکول های آب و یون های فلزی، برای تمامی یون های فلزی برابر می باشد، زیرا بارهای الکترواستاتیکی هر سه یون $+2e$ است. از آنجائی که انرژی پتانسیل برابر با مجموع انرژی پتانسیل الکترواستاتیکی و انرژی پتانسیل واندروالس می باشد و با توجه به برابری انرژی پتانسیل الکترواستاتیکی برای هر سه یون، بررسی تغییرات انرژی پتانسیل واندروالس از اهمیت زیادی برخوردار است. در شکل ۱ تغییرات انرژی پتانسیل



شکل (۳) اولین لایه مولکول های آب اطراف یون های فلزی، الف: یون سرب ، ب: یون کادمیوم، ج: یون نیکل.

شکل ۴ تغییرات سرعت یون های فلزی سرب، نیکل و کادمیوم محلول در آب را در زمان های مختلف نشان می دهد. همچنین مقادیر سرعت متوسط این یون ها در جدول ۵ آورده شده است. این نتایج نشان می دهد که اگر چه تعداد مولکول های آب احاطه کننده یون سرب و نیکل نسبت به یون کادمیوم بیشتر است اما سرعت متوسط این یون ها بیشتر از سرعت متوسط یون کادمیوم می باشد. در حقیقت مولکول های پوسته اول آب اطراف یون سرب و نیکل در فاصله بیشتری نسبت به یون کادمیوم قرار می گیرند و یونهای فلزی سرب و نیکل آزادی عمل بیشتری در حرکت خواهند داشت. با توجه به معادله ۱، هر چه فاصله بین یون فلزی و مولکول آب کمتر باشد، نیروی جاذبه بین آنها بیشتر خواهد بود. براحتی میتوان دریافت که هر چه نیروی بین مولکول های آب و یون



شکل (۲) تابع ρ برای یون های فلزی، الف: یون سرب، ب: یون کادمیوم، ج: یون نیکل.

جدول (۴) مشخصات مولکول های شرکت کننده در پوسته اول اطراف یون های فلزی سرب، نیکل و کادمیوم

سیستم	متوسط تعداد مولکول های تشکیل دهنده لایه اول	فاصله متوسط مولکولهای آب از یون فلزی [Å]
محلول دارای یون سرب	۸	۲٫۶۵
محلول دارای یون نیکل	۸٫۴	۲٫۶۴
محلول دارای یون کادمیوم	۷	۲٫۳۵

جدول (۵) سرعت متوسط یون های فلزی سرب، نیکل و کادمیوم محلول در آب در دمای ۲۵ درجه سانتیگراد.

یون فلزی	سرعت متوسط [Å/ps]
سرب، Pb^{2+}	۲,۴۷
نیکل، Ni^{2+}	۲,۸۷
کادمیوم، Cd^{2+}	۲,۲۴

مدت زمان حضور اولین مولکول های آب تشکیل دهنده پوسته اول اطراف یون های فلزی در شکل ۵ نشان داده شده است. همانگونه که انتظار می رفت مدت زمان حضور مولکول های آب اطراف یون کادمیوم بیشتر است زیرا این مولکول ها در فاصله نزدیکتری از یون فلزی مستقر می شوند. بر اساس این نمودار متوسط حضور اولین مولکول های تشکیل دهنده پوسته برای سرب، حدود ۱۶۲ پیکوثانیه، برای نیکل ۱۶۱٫۵ پیکوثانیه و برای یون کادمیوم ۱۷۹ پیکوثانیه می باشد.

۴- نتیجه گیری

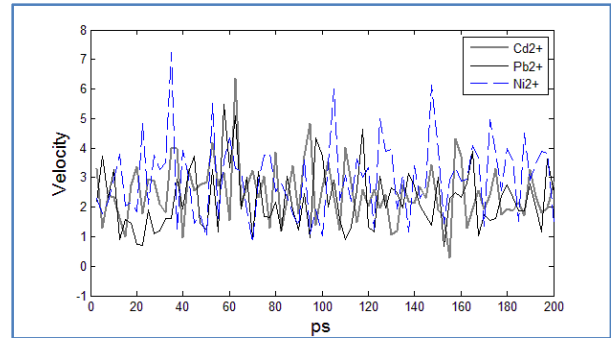
در تحقیق حاضر، خواص محلول آب و یون های فلزی سرب، نیکل و کادمیوم بکمک شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان از تشکیل یک وضعیت پوسته مانند از مولکول های آب در اطراف یون های فلزی می دهد. این وضعیت در اثر تشکیل کمپلکس $M(H_2O)$ است که برای یون سرب بصورت $Pb(H_2O)_8$ ، برای یون نیکل بصورت $Ni(H_2O)_{8.4}$ و برای یون کادمیوم به صورت $Cd(H_2O)_7$ می باشد. بر اساس نتایج بدست آمده مدت زمان استقرار مولکول های آب در فاصله نزدیک به یون فلزی برای کادمیوم بیشتر از نیکل، و برای نیکل بیشتر از سرب می باشد. حضور پایدار تر مولکول های آب حول یون های فلزی با ترتیب مقدار جذب این یونها همسان است و این امر می تواند یکی از عوامل جذب کمتر یون کادمیوم نسبت به یون های سرب و نیکل بر روی جاذب های کربنی باشد.

علائم اختصاری و نمادها

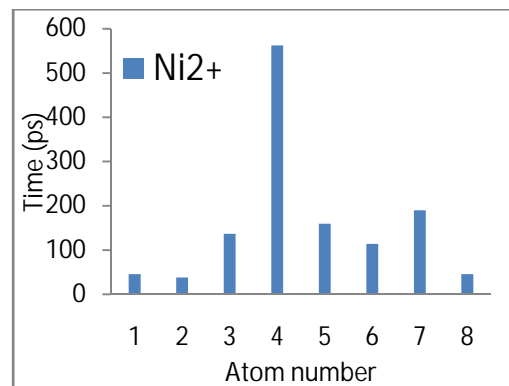
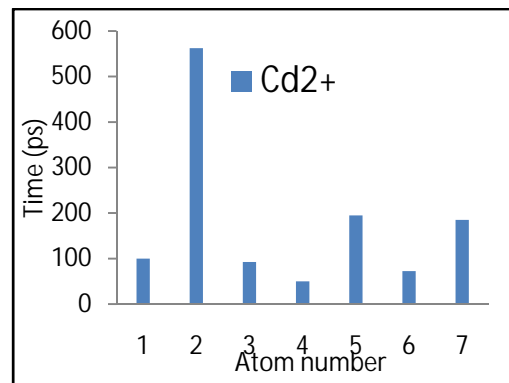
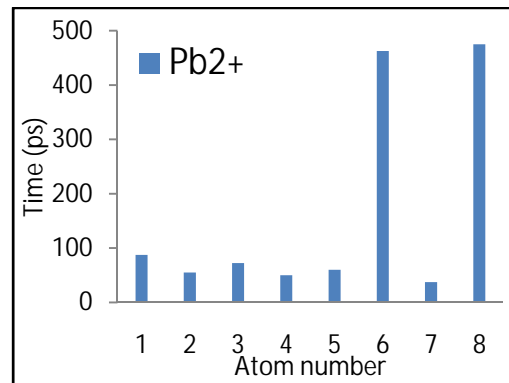
علائم انگلیسی

E	انرژی کل سیستم، aJ
K	انرژی جنبشی سیستم، aJ
K_b	ثابت بولتزمن، aJ/molecule/K
N	تعداد کل مولکول های سیستم
n_r	تعداد مولکول های آب در فاصله شعاعی r از یون فلزی
q	بار الکترواستاتیکی

فلزی کمتر باشد، احتمال حرکت یون و جذب آن توسط یک عامل خارجی (مانند انواع جاذب) بیشتر خواهد بود.



شکل (۴) تغییرات سرعت یون های فلزی سرب، نیکل و کادمیوم محلول در آب.



شکل (۵) مدت زمان حضور اولین مولکول های شرکت کننده در پوسته تشکیل شده اطراف یون های فلزی.

- [10] Q. Li, S.Wu, G. Liu, X. Liao, X. Deng, D. Sun, Y. Hu and Y. Huang (2004) "Simultaneous biosorption of cadmium (II) and lead (II) ions by pretreated biomass of phanerochaetechrysosporium", *Separation and Purification Technology*, 34, 135-142.
- [11] F. Ekmekyapar, A. Aslan, Y.K. Bayhan and A. Cakici (2006) "Biosorption of copper (II) by nonliving lichen biomass of cladoniarangiformishoffm", *Journal of Hazardous Materials*, 137, 293-298.
- [12] C. V. Diniz, F. M. Doyle and V. S. T. Ciminelli (2002) "Effect of pH on the adsorption of selected heavy metal ions from concentrated chloride solutions by the chelating resin dowex M-4195", *Separation Science and Technology*, 37, 3169-3185.
- [13] Z. Gao, T. J. Badosz, Z. Zhao, M. Han and J. Qiu (2009) "Investigation of factors affecting adsorption of transition metals on oxidized carbon nanotubes", *Journal of Hazardous Materials*, 167, 357-365.
- [14] Z. Zang, Z. Hu, Z. Li, Q. He and X. Chang (2009) "Synthesis, characterization and application of ethylenediamine-modified multiwalled carbon nanotubes for selective solid-phase extraction and preconcentration of metal ions", *Journal of Hazardous Materials*, 172, 958-963.
- [15] Y. H. Li, S. Wang, J. Wei, X. Zhang, C. Xu, Z. Luan, D. Wu and B. Wei (2002) "Lead adsorption on carbon nanotubes", *Chemical Physics Letters*, 357, 263-266.
- [16] Z. C. Di, J. Ding, X.J. Peng, Y. H. Li, Z. K. Luan and J. Liang (2006) "Chromium adsorption by aligned carbon nanotubes supported ceria nanoparticles", *Chemosphere*, 62, 861-865.
- [17] C. Lu and C. Liu (2006) "Removal of nickel (II) from aqueous solution by carbon nanotubes", *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 81, 1932-1940.
- [18] Y. H. Li, S. Wang, Z. Luan, J. Ding, C. Xu and D. Wu (2003) "Adsorption of cadmium(II) from aqueous solution by surface oxidized carbon nanotubes", *Carbon*, 41, 1057-1062.
- [19] C. Lu and H. Chiu (2006) "Adsorption of zinc (II) from water with purified carbon nanotubes", *Chemical Engineering Science*, 61, 1138-1145.
- [20] C. Lu, H. Chiu and C. Liu (2006) "Removal of zinc (II) from aqueous solution by purified carbon nanotubes: kinetics and equilibrium studies", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45, 2850-2855.
- [21] S. Hi Lee and J. Rasaiah (1994) "Molecular dynamics simulation of ionic mobility. I. Alkali metal cations in water at 25 °C", *Journal of*

فاصله بین اتم ها، Å	R
فاصله متوسط از یون فلزی بین r_1 و r_2	r_p
درجه حرارت، K	T
انرژی پتانسیل، aJ	U
فاصله شعاعی از یون فلزی، Å	r_1
فاصله شعاعی از یون فلزی، Å	r_2

علائم یونانی

عمق موثر	ϵ
قطر برخورد اتم، Å	σ
ثابت دی الکتریک	ϵ_0

زیر نویس

شماره اتم	i, j
الکترواستاتیکی	q
واندروالس	vdW
کل	Tot

مراجع

- [1] A. Stafiej and K. Pyrzynska (2008) "Adsorption of heavy metal ions with carbon nanotubes", *Separation and Purification Technology*, 58, 49-52.
- [2] G. Purnachadra, C. Lu and F. Su (2007) "Sorption of divalent metal ions from aqueous solution by carbon nanotubes: A review", *Separation and Purification Technology*, 58, 224-231.
- [3] M. M. Rao, A. Ramesh, G.P.C. Rao and K. Seshiah (2006) "Removal of copper and cadmium from the aqueous solutions by activated carbon derived from ceibapentandra hulls", *Journal of Hazardous Materials*, 129, 123-129.
- [4] M. Sekar, V. Sakthi and S. Rengaraj (2004) "Kinetics equilibrium adsorption study of lead(II) onto activated carbon prepared from coconut shell", *Journal of Colloid Interface Science*, 279, 307-313.
- [5] J. Ayala, F. Blanco, P. Garcia and P. Rodriguez (1998) "Asturian fly ash as a heavy metals removal material", *fuel*, 77, 1147-1154.
- [6] C. H. Weng and C. P. Huang (2004) "Adsorption characteristics of Zn(II) from dilute aqueous solution by fly ash", *Colloids and Surfaces A*, 247, 137-143.
- [7] Y.S. Ho and G. McKay (1999) "The sorption of lead (II) ions on peat", *Water Research*, 33, 578-584.
- [8] S. C. Pan, C. C. Lin and D. Hwa (2003) "Reusing sewage sludge ash as adsorbent for copper removal from wastewater", *Resources, Conservation and Recycling*, 39, 79-90.
- [9] B. Biskup and B. Subotic (2004) "Removal of heavy metal ions from solutions using zeolites. III. Influence of sodium ion concentration in the liquid phase on the kinetics of exchange processes between cadmium ions from solution and sodium ions from zeolite A", *Separation Science and Technology*, 39,

- [26] S. Shokri, R. Mohammadikhah, H. Abolghasemi, A. Mohebbi, H. Hashemipour, M. Ahmadi-Marvast and Sh. JafariNejad (2010) "Molecular Dynamic Simulation of Multilayer Methane Adsorption on/in Open Ended Single-Walled Carbon Nanotubes", *International Journal of Chemical Engineering and Applications*, 1, 63-69.
- [27] R. López-Rendón, and J. Alejandro (2008) "Molecular Dynamics Simulations of the Solubility of H₂S and CO₂ in Water", *Journal of the Mexican Chemical Society*, 52, 88-92.
- Chemical Physics*, 101, 6964-6974.
- [22] E. Brodskaya, A. P. Lyubartsev and A. Laaksonen (2002) "Molecular dynamics simulations of water clusters with ions at atmospheric conditions", *Journal of chemical physics*, 116, 7879-7892.
- [23] J. C. Wu, J. Piquemal, R. Chaudret, P. Reinhardt and P. Ren (2010) "Polarizable Molecular Dynamics Simulation of Zn(II) in Water Using the AMOEBA Force Field", *Journal of Chemical Theory and Computation*, 6, 2059-2070.
- [24] A. R. Ansari dezfoli, Z. Adabavazeh and S. Mehrabian (2011) "A molecular dynamic simulation investigation into the behavior of water molecules inside carbon nanotubes", *Nanomechanics Science and Technology: An International Journal*, 1, 247-255.
- [25] K. Johnson, R. Cygan and J. Fein (2006) "Molecular simulations of metal adsorption to bacterial surfaces", *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 70, 5075-5088.

Investigation of Cadmium (Cd^{2+}), Lead(Pb^{2+}), and Nickel (Ni^{2+}) Ions Behavior in an Aqueous Solution Using Molecular Dynamics Simulation

Amir Reza Ansari Dezfoli¹, Mozaffar Ali Mehrabian^{2,*}, Hasan Hashemipour³

1. Mechanical Engineering Department, Faculty of Engineering, Shahid Bahonar University of Kerman, Iran, kadr_basteh@yahoo.com
2. Mechanical Engineering Department, Faculty of Engineering, Shahid Bahonar University of Kerman, Iran, ma_mehrabian@uk.ac.ir
3. Chemical Engineering Department, Faculty of Engineering, Shahid Bahonar University of Kerman, Iran, hashemipur@uk.ac.ir

ABSTRACT

In this paper the characteristics of heavy metal ions solved in water were investigated using the molecular dynamics simulation; so that the ions velocity, the arrangement of water molecules around the heavy metal ions, and the rate of adsorption of the heavy metal ions in carbon based sorbents were predicted. The results showed that the water molecules around the metal ions form a shell-like arrangement and make the $\text{M}(\text{H}_2\text{O})$ complex. The number of water molecules contributing to make the shell-like arrangement is 8 for lead, 8.4 for nickel, and 7 for cadmium. It was found that the residence time of the water molecules in the shell around the lead, cadmium, and nickel ions are 162 ps, 179 ps, and 161.5 ps respectively. It was observed that the $\text{Cd}(\text{H}_2\text{O})$ complex is more stable than the $\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})$; and the $\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})$ complex is more stable than the $\text{Pb}(\text{H}_2\text{O})$.

All right reserved.

ARTICLE INFO

Article history:

Received: 9 Oct. 2011

Received in revised form: 16 July 2012

Accepted: 21 July 2012

Key words:

Heavy metal ions

Molecular dynamics

Simulation

* Corresponding author