

รูปแบบ Abstract (บทคัดย่อ)

---

**Project Code :** MRG5480160

(รหัสโครงการ)

**Project Title :**

Study on adsorption in wastewater treatment by experimental and computational chemistry approach

(ชื่อโครงการ)

การศึกษาการบำบัดน้ำเสียด้วยวิธีการดูดซับ                      โดยการใช้วิธีการทดลองและระเบียบทางวิธี  
คำนวณ

**Investigator :** ชื่อนักวิจัย และสถาบัน

(ชื่อนักวิจัย)

ผศ.ดร.กิตติยาพร พงษ์ประเทศ มหาวิทยาลัยขอนแก่น วิทยาเขตหนองคาย

**E-mail Address :**

drkittywitt@gmail.com

**Project Period :** 2 ปี

(ระยะเวลาโครงการ)

**Abstract**

The ability of cigarette filter added with chitosan (CFAC) for the  $\text{Fe}^{2+}$  removal from aqueous solution has been investigated by adsorption method and computational chemistry approach. It is found that the Freundlich isotherm can well describe the  $\text{Fe}^{2+}$  adsorption in CFAC. The experimental data suggests the pseudo-second-order equation represented as the adsorption model. The  $\text{Fe}^{2+}$  ions were adsorbed spontaneously on the CFAC and the possible process is more favorable at higher temperatures. In addition, the computational approach also suggested that nitrogen atoms of chitosan are preferential adsorption site for  $\text{Fe}^{2+}$ . However, CFAC is not the appropriate for  $\text{Fe}^{2+}$  removal because the ability of adsorption is very low (4.972 mg/g). Therefore, this research also tested the ability of chitosan and chitin with the other adsorbate which is malachite green (MAL). MAL is the most widely used dye for coloring purposes. The results show that the Langmuir isotherm can well describe the MAL adsorption by chitin

and chitosan. The maximum quantities of the MAL adsorption are 97.09 and 166.67 mg/g for chitin and chitosan, respectively. This indicates that the chitosan has more effective than the chitin two times approximately which corresponds with the thermodynamic data.

### บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้ได้ศึกษาถึงความสามารถในการดูดซับ  $Fe^{2+}$  ด้วย ก้านกรองบุหรีที่เติมด้วยไคโตซาน โดยวิธี การดูดซับและวิธีทางเคมีคำนวณ ผลวิจัยพบว่า การดูดซับ  $Fe^{2+}$  ด้วย ก้านกรองบุหรีที่เติมด้วยไคโตซาน สอดคล้องกับ ไอโซเทอร์ม ของ เฟรนดิช และ สมการ ชูโต เซคัล ออร์ เดอร์ สำหรับ สมการจลนพลศาสตร์  $Fe^{2+}$  ถูกดูดซับด้วยก้านกรองบุหรีที่เติมด้วยไคโตซานได้ดีขึ้นเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น ยิ่งไปกว่านั้น วิธีการทางเคมีคำนวณ ยังเสนอว่าอะตอมไนโตรเจน ในไคโตซาน เป็นตำแหน่งที่ยึดจับกับ  $Fe^{2+}$  อีกด้วย อย่างไรก็ตาม ก้านกรองบุหรีที่เติมด้วยไคโตซาน ก็ยังไม่เหมาะสมในการกำจัดโลหะเหล็ก เนื่องจากความสามารถในการดูดซับต่ำมาก มี ความสามารถเพียงแค่ 4.972 มิลลิกรัม ต่อ กรัม เท่านั้น ดังนั้น งานวิจัยนี้จึงได้มีการศึกษาเพิ่มเติมโดยการทดสอบ ความสามารถไคโตซานและไคติน ด้วยตัวถูกดูดซับอื่น ซึ่งก็คือ มาลาไคท์ กรีน มาลาไคท์ กรีน นี้ ได้มีการถูกนำมาใช้อย่างกว้างขวางสำหรับกระบวนการย้อมสี ผล ภาศึกษาการดูดซับ มาลาไคท์ กรีน ด้วยไคตินและไคโตซานนั้น เป็นไปตามไอโซเทอร์มของ แลงเมียร์ ความสามารถในการดูดซับมาลาไคท์ กรีน ด้วย ไคตินและไคโตซาน คือ 97.00 และ 166.67 มิลลิกรัม ต่อ กรัม ตามลำดับ สรุปได้ว่าไคโตซานมีความสามารถในการดูดซับได้ดีกว่า ไคติน ประมาณ 2 เท่า ซึ่งสอดคล้องกับผลทางเทอร์โมไดนามิกส์

**Keywords :** จำนวน 3-5 คำ

การดูดซับ, การกำจัดโลหะหนัก, การกำจัดสีย้อม, มาลาไคท์ กรีน, โมเลคิวลาร์ ไดนามิกส์ ซิมูเลชัน