

К. Степова, Л. Сиса, Р. Конанець

Нелінійне моделювання сорбції іонів Феруму бентонітом в рамках теоретичних моделей

Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Львів, Україна; katyastepova@gmail.com

Проведено порівняльне дослідження придатності адсорбційних моделей для опису експериментальних ізотерм адсорбції іонів Феруму на двох зразках: природного бентоніту та бентоніту опроміненого НВЧ-опроміненням. Ізотерми сорбції описані за допомогою теорій Ленгмюра, Фрейндліха, Редліха-Петерсона та Ленгмюра-Фрейндліха. Визначені константи та параметри зазначених рівнянь. Нелінійне моделювання експериментальних даних в рамках теоретичних моделей ізотерм продемонструвало, що адсорбція нативним бентонітом відповідає трипараметричній моделі Редліха-Петерсона, а НВЧ-опроміненним – ізотермі Фрейндліха. Таке моделювання дає змогу передбачити максимальну адсорбційну здатність, що складає 37,7 мг/г природного бентоніта та 64,4 мг/г модифікованого зразка.

Ключові слова: бентоніт; надвисокочастотне випромінювання; адсорбція; мідь; нелінійне моделювання.

Подано до редакції 4.08.2021; прийнято до друку 4.04.2022.

Вступ

Залізо є одним з найпоширеніших природних елементів. Його присутність в природній воді є поширеною проблемою, адже така вода спричиняє цілий ряд проблем, як у побуті, так і у промисловості. У стічні води залізо може потрапляти з травильних і гальванічних цехів, операцій підготовки металевих поверхонь, цехів фарбування тканин і інших виробництв. У водному середовищі воно присутнє найчастіше у формі бікарбонату, закису, сульфідів.

В даний час очищення стічних вод різних виробництв є актуальною у зв'язку з наростаючим зростанням антропогенного навантаження на навколишнє середовище. Іони важких металів є одними з найбільш поширених забруднювачів навколишнього середовища, які призводять до зміни фізико-хімічних властивостей стічних вод, порушують процеси біологічного самоочищення водойм, впливають на стан здоров'я людини і живих організмів [1, 2]. Відомі способи очищення стічних вод від іонів важких металів засновані на колоїдно-хімічних процесах флокуляції, адсорбції, осадження і

т.д. Однак більшість з них є дорогими, складними у використанні, орієнтовані на імпортне обладнання і дефіцитні реагенти. У зв'язку з цим особливий інтерес представляють недорогі і ефективні способи очищення стічних вод, засновані на використанні відходів промисловості і місцевої сировини як сорбенту [3-6]. Ефективність методу мікрохвильової обробки бентоніту з метою збільшення його максимальної адсорбційної здатності щодо іонів важких металів Zn [7, 8], Pb [9], Cu [10] була описана раніше. У даній роботі представлено результати адсорбційного вилучення іонів Fe із водних розчинів під дією мікрохвильового опромінення.

Адсорбція - це процес, що широко використовується для видалення забруднень із стічних вод. Для проектування процесу адсорбції та його подальшої ефективної роботи необхідно встановити параметри рівноважного стану процесу з метою подальшого їх застосування у кінетичних та масообмінних моделях. Ці моделі можуть бути використані для прогнозування ефективності процесів адсорбційного очищення за різних робочих умов.

Основна мета даного дослідження полягає у

встановленні типу ізотерм, що найкращим чином описують досліджуваний процес на заданому матеріалі. Набори параметрів ізотерм визначали, використовуючи $sgjcs$, мінімізації ряду функцій похибок.

тільки певна молекула займає одну з ділянок, подальша адсорбція на цьому місці не відбувається. У рівнянні (1), K_L — константа ізотерми Ленгмюра, яка характеризує афінність адсорбента та адсорбата, dm^3/mg ; q_m — максимальна сорбційна ємність, mg/g сорбента; C_e і q_e — рівноважні концентрації компонента у рідкій та твердій фазах відповідно.

I. Матеріали та методи

1.1. Експериментальні дослідження

Досліджуваний природний бентоніт за даними рентгенофазового аналізу складається з основних чотирьох мінералів: гідрослюди (близько 27%), монтморилоніту (близько 25%), кварцу (приблизно 22%), хлориту (близько 20%) та деяких домішок (кальцит, силівніт та інші мінерали). рН водного екстракту глинистого сорбента 8,92; насипна густина – 1244 kg/m^3 ; коефіцієнт набухання ~ 2.

Сорбційні властивості бентоніту вивчали у статичних умовах. Адсорбцію проводили у дві серії: за кімнатної температури та під дією НВЧ випромінювання.

Першу серію дослідів отримували таким чином. У 10 мірних стаканів ємністю 150 мл заливали по 100 мл робочого розчину відповідної концентрації та додавали по 1,0 г бентоніту, перемішували та залишали на 24 години. Потім розчини фільтрували та аналізували на вміст іонів Феруму (III).

Другу серію зразків після змішування з адсорбентом піддавали обробці НВЧ ЕМВ середньої потужності у три етапи по 120 с кожен. Після кожного етапу розчин перемішували. Після остигання розчин фільтрували з подальшим визначенням рівноважних концентрацій іонів Феруму (III) у розчині.

Вміст іонів Fe^{3+} у розчинах визначали атомно-абсорбційним методом. Усі експерименти повторювали тричі.

1.2. Моделювання в рамках теоретичних моделей ізотерм адсорбції

Уявлення про динамічний процес адсорбційного вилучення розчиненої речовини з розчину твердим адсорбентом залежить від характеристики рівноважного розподілу речовини між двома фазами. Стан адсорбційної рівноваги досягається тоді, коли кількість адсорбованої поглиначем речовини, дорівнює кількості десорбованої. В цей момент рівноважна концентрація розчину залишається сталою. Побудувавши графічну залежність рівноважної концентрації речовини у твердій фазі від її рівноважної концентрації у розчині, можна отримати рівноважну ізотерму адсорбції. Існує багато теорій адсорбційної рівноваги.

Ізотерма Ленгмюра

Теорія ізотерми Ленгмюра передбачає утворення моношару адсорбата над однорідною поверхнею адсорбента [11]. При досягненні стану рівноваги встановлюється стан насичення, коли подальше поглинання є неможливим. В рамках даної моделі припускається, що сорбція відбувається на певних однорідних ділянках на поверхні адсорбенту. Як

$$q_e = \frac{q_m K_L C_e}{1 + K_L C_e} \quad (1)$$

Рівняння Ленгмюра застосовується для опису однорідного поглинання, коли сорбція кожної молекули має однакову енергію активації.

Ізотерма Фрейндліха

Вираз Фрейндліха (2) є експоненціальним рівнянням, а отже можна припустити, що зі збільшенням концентрації розчину зростає і концентрація адсорбату на поверхні адсорбента. Теоретично даний вираз допускає протікання нескінченного процесу адсорбції [12].

$$q_e = K_F C_e^{1/n_f} \quad (2)$$

У цьому рівнянні K_F — константа ізотерми Фрейндліха, яка характеризує адсорбційну ємність, mg/g сорбенту. Чим більше значення K_F , тим більша адсорбційна ємність. Цей вираз характеризується коефіцієнтом гетерогенності, n_f , і тому ізотерму Фрейндліха можна використовувати для опису неоднорідних систем [13, 14]. Рівняння Фрейндліха добре узгоджується з теорією Ленгмюра у діапазоні невисоких концентрацій, але, на відміну від моделі Ленгмюра, воно не зводиться до лінійної ізотерми (закон Генрі) при низькому насиченні поверхні. Обидві ці теорії мають один недолік – значення рівноважних концентрацій в широкому діапазоні концентрацій не може описуватись за допомогою однакового набору значень констант (McKay, 1980).

Ізотерма Редліха-Петерсона

Редліх і Петерсон [15] запропонували трипараметричне емпіричне рівняння, яке може бути використано для опису адсорбційної рівноваги в широкому діапазоні концентрацій [16]. Це гібридна модель ізотерми, яка включає в себе ізотерми Фрейндліха та Ленгмюра. Оскільки ця модель є комбінацією двох моделей, то механізм адсорбції не відповідає ідеальній моношаровій адсорбції. Це універсальна модель ізотерми, яка може застосовуватися для однорідних та неоднорідних систем.

$$q_e = \frac{K_{RP} C_e}{1 + a_{RP} C_e^\beta} \quad (3)$$

Це рівняння зводиться до лінійної ізотерми при низьких концентраціях адсорбату на поверхні, до ізотерми Фрейндліха – при високих концентраціях адсорбату та до ізотерми Ленгмюра при $\beta = 1$.

Ізотерма Ленгмюра-Фрейндліха

За низьких концентрацій адсорбату модель Ленгмюра-Фрейндліха зводиться до ізотерми Фрейндліха, в той час як за високих концентрацій вона прогнозує адсорбційну здатність моношару, що характерна для ізотерми Ленгмюра.

$$q_e = \frac{q_m(K_{LF}C_e)^{n_{LF}}}{1+(K_{LF}C_e)^{n_{LF}}}, \quad (4)$$

де q_m та K_{LF} - адсорбційна ємність та константа афінності відповідно, n_{LF} — коефіцієнт неоднорідності або міра інтенсивності адсорбції. Якщо $n_{LF} = 1$, то рівняння (5) зводиться до ізотерми Ленгмюра.

Оскільки перетворення ізотерми в лінеаризовані форми призводить до зміни структури похибок експериментальних даних, нелінійний аналіз став незамінним, оскільки він забезпечує точний метод визначення параметрів адсорбції без зміни вихідної форми ізотермічних рівнянь. До того ж лінійне моделювання є непридатним для трипараметричних ізотерм. У контексті даної роботи було досліджено п'ять різних функцій похибок, і в кожному випадку параметри ізотерми визначали, мінімізуючи відповідну функцію похибки в діапазоні концентрацій рідкої фази за допомогою надбудови "Пошук розв'язку" в електронній таблиці MS Excel.

1. Сума квадратів абсолютних похибок (SSE). Ця широко використовувана функція похибок має один основний недолік. Функція забезпечує кращу відповідність розрахунковим параметрам у верхньому діапазоні концентрацій рідкої фази. Це пояснюється тим, що величина похибок а, отже, і квадрат похибок збільшуватиметься із збільшенням концентрації.

$$\sum_{i=1}^n (q_{e_exp} - q_{e_calc})_i^2 \quad (5)$$

де q_{e_exp} q_{e_calc} - це вміст адсорбату в сорбенті, визначений експериментально та розрахунковим шляхом відповідно, мг/г сорбента;

2. Гібридна фракційна похибка (HYBRID). Ця функція похибок була розроблена [17] з метою покращення відповідності SSE-функції в діапазоні низьких концентрацій рідкої фази. У цьому методі кожне значення SSE ділили на експериментальне значення концентрації твердої фази. Крім того, дільник включає в себе кількість ступенів свободи системи — кількість експериментальних точок мінус кількість параметрів у рівнянні ізотерми.

$$\frac{100}{n-p} \sum_{i=1}^n \left(\frac{(q_{e_exp} - q_{e_calc})^2}{q_{e_exp}} \right)_i \quad (6)$$

де p – кількість параметрів моделі, що підлягають визначенню.

3. Стандартне відхилення за Марквардом (MPSD). Ця функція похибок [18] схожа на модифіковане стандартне відхилення з метою врахування кількості ступенів свободи системи.

$$100 \sqrt{\frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^n \left(\frac{q_{e_exp} - q_{e_calc}}{q_{e_exp}} \right)_i^2} \quad (7)$$

4. Середня відносна похибка (ARE) [19]. Ця функція похибок мінімізує розподіл дробових часток у всьому діапазоні концентрацій.

$$\frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{q_{e_exp} - q_{e_calc}}{q_{e_exp}} \right|_i \quad (8)$$

5. Сума абсолютних похибок (SAE). У цій функції похибок підхід подібний до методу SSE. Параметри ізотерми, визначені за допомогою цього методу, будуть краще збігатись по мірі збільшення величини похибок, тобто зсуваючись в бік даних з діапазону високих концентрацій.

$$\sum_{i=1}^n |q_{e_exp} - q_{e_calc}|_i \quad (9)$$

Для більш точної оцінки моделей було проведено два експериментальні вимірювання для експериментальних значень, які не використовувались для моделювання ізотерм. Для кожної моделі параметри ізотерми були розраховані шляхом мінімізації похибок та обчислення інших функцій похибок та суми нормалізованих похибок (SNE). Ізотерми, що найкраще підходять, вибиралися виходячи зі значення похибок експериментальних значень і використовувались для встановлення механізму адсорбції та отримання максимальної адсорбційної ємності адсорбенту.

II. Результати та їх обговорення

Внаслідок проведених експериментальних досліджень та розрахунку максимальної сорбційної ємності шляхом нелінійного моделювання в рамках моделі Ленгмюра вдалось встановити, що опромінення природного бентоніту НВЧ-опроміненням сприяє збільшенню сорбційної ємності матеріалу у 1,7 раза. Відповідно насичення природного бентоніту з 37,7 зростає до 64,4 мг/г сорбенту.

Визначенні шляхом мінімізації похибок параметри ізотерм наведено у табл. 1 - 4. Очевидно, що для опису процесу сорбції природним бентонітом найменше значення суми нормалізованих похибок досягається переважно при мінімізації суми абсолютних похибок та/або середньої відносної похибки, що є характерним для діапазону високих концентрацій. Натомість у випадку опроміненого зразка найкращих наближень вдається досягнути при мінімізації стандартного відхилення за Марквардом

Таблиця 1

Значення максимальної сорбційної ємності q_m та константи ізотерми Ленгмюра K_L за результатами аналізу похибок.

	Мінімізована похибка				
	SAE	ARE	SSE	MPSD	HYBRID
Природний бентоніт					
q_m	37.700917	37.700932	37.424889	36.581272	36.856051
K_L	0.108400236	0.108397008	0.10145356	2.303186403	0.127669975
SAE	19.437	19.562	19.437	29.066	21.900
ARE	14.083	12.996	13.387	16.503	14.084
SSE	142.397	132.457	131.247	155.527	134.553
MPSD	36.8278	35.531	35.657	34.611	35.233
HYBRID	163.116	150.868	151.164	153.230	149.642
SNE	4.328452	4.325778	4.322607	4.3623269	4.3378071
НВЧ-опромінений бентоніт					
q_m	64.636792	64.641621	64.297085	63.867789	64.439166
K_L	0.042587553	0.042580848	0.046920508	0.046580696	0.04552693
SAE	19.942	19.942	22.193	21.615	21.483
ARE	13.082	13.082	14.018	13.781	13.729
SSE	156.639	156.639	150.405	151.647	150.946
MPSD	35.6880	35.6880	35.623	35.610	35.616
HYBRID	157.709	157.709	156.565	156.542	156.321
SNE	4.354765	4.354765	4.354089	4.3545008	4.3538925

Таблиця 2

Значення коефіцієнту гетерогенності n_f та константи ізотерми Фрейндліха K_F та за результатами аналізу похибок.

	Мінімізована похибка				
	SAE	ARE	SSE	MPSD	HYBRID
Природний бентоніт					
n_f	6.8480727	6.85	7.5109224	6.8002076	7.0680319
K_F	15.14552989	15.15	16.39741252	15.17407098	15.6358158
SAE	12.206	12.206	12.507	12.388	12.335
ARE	4.173	4.173	5.231	4.223	4.577
SSE	25.071	25.071	21.101	25.151	22.594
MPSD	5.608	5.608	7.244	5.551	5.827
HYBRID	10.448	10.448	11.093	10.352	9.868
SNE	3.448	3.448	3.498	3.480	3.585
НВЧ-опромінений бентоніт					
n_f	4.3010416	4.26	4.7303056	4.1520125	4.303366
K_F	15.53661922	15.32	17.49209459	14.70767554	15.53722861
SAE	32.942	33.343	34.060	35.522	32.961
ARE	9.235	9.219	11.573	10.001	9.241
SSE	206.431	210.282	190.320	224.939	206.432
MPSD	15.300	15.152	18.238	14.949	15.296
HYBRID	76.796	76.913	86.341	78.943	76.794
SNE	3.597	3.582	3.778	3.544	3.597

Таблиця 3

Значення коефіцієнтів ізотерми Редліха-Петерсона за результатами аналізу похибок.

	Мінімізована похибка				
	SAE	ARE	SSE	MPSD	HYBRID
Природний бентоніт					
β	0.8834793	0.8834793	0.8821875	0.8705815	0.8760855
a_{RP}	13.77	13.77	14.00	22.88	17.84
K_{RP}	251.29139	251.29139	251.27828	383.58885	308.8414
SAE	9.321788809	9.321788809	10.0388077	10.59500348	10.33177327
ARE	3.377237862	3.377237862	3.611364056	3.598404691	3.591417813
SSE	16.39990674	16.39990674	15.60777264	17.16392933	16.04958861
MPSD	4.758315152	4.758315152	4.497875417	4.193481495	4.260172455
SNE	3.597	3.582	3.778	3.544	3.597

Таблиця 3 (продовження)

HYBRID	9.322208184	9.322208184	8.611214248	8.538878227	8.325524995
SNE	3.59	3.59	3.67	3.67	3.70
НВЧ-опромінений бентоніт					
β	0.779656	0.7798172	0.7886096	0.759176	0.7722366
arp	36.21	36.21	9099.98	10814.25	36.83
K _{RP}	586.3722	586.25741	159187.91	159071.37	586.92939
SAE	32.34694435	32.35095474	34.05624852	35.51954385	32.83360906
ARE	9.130463759	9.127700765	11.57085179	10.00173148	9.417313945
SSE	210.8315159	211.9887439	190.3015599	224.9036963	200.3522502
MPSD	13.78904694	13.79265236	16.08224763	13.18476915	13.66332899
HYBRID	92.82348394	93.11731244	100.7171522	92.09544296	89.23610611
SNE	3.79	3.78	3.95	3.71	3.79

Таблиця 4

Значення адсорбційної ємності q_m , константи афінності K_{LF} та коефіцієнту неоднорідності n_{LF} ізотерми Ленгмюра-Фрейндліха за результатами аналізу похибок.

	Мінімізована похибка				
	SAE	ARE	SSE	MPSD	HYBRID
Природний бентоніт					
q_m	60.51720934	72.50	57.59	72.64	60.5171511
K_{LF}	0.014440097	0.002845539	0.020050544	0.002601976	0.01315058
n_{LF}	0.2464876	0.2220414	0.2648458	0.2217918	0.2506052
SAE	7.603379498	7.879	8.019	8.616	8.009653603
ARE	3.558172654	3.531	4.228	3.898	3.960733997
SSE	10.21882702	11.015	9.313	10.799	9.474606668
MPSD	5.869405142	5.378	6.082	5.195	5.551314518
HYBRID	9.085876707	8.667	8.600	8.316	8.119882882
SNE	3.871132	3.901336	4.0419979	4.0500803	4.0833367
НВЧ-опромінений бентоніт					
q_m	64.474981	232.37	232.37079	82.818686	141.7157
K_{LF}	0.042793202	4.77568E-05	6.43714E-05	0.02187358	0.001135538
n_{LF}	1.0146113	0.2642641	0.2810225	0.4905086	0.3250694
SAE	19.81523714	30.316	27.632	31.795	29.75217404
ARE	16.7817071	11.526	15.955	12.483	13.1539591
SSE	156.6931986	185.247	134.353	189.683	154.6600378
MPSD	47.38382313	20.817	29.267	20.093	21.48811219
HYBRID	277.4234244	131.125	151.461	127.166	121.2695626
SNE	4.02837	4.230994	4.3494794	4.1869799	4.2911517

Таблиця 5

Результати аналізу похибок моделювання на основі розрахунку відхилення експериментальних значень від розрахованих за різними моделями.

Розрахункові значення q_m заданої точки, визначені за допомогою теоретичних моделей ізотерм	Мінімізована похибка					SNE	
	SAE	ARE	SSE	MPSD	HYBRID		
Природний бентоніт – координати точки [324.4;37.12]							
Ленгмюра	36.31	0.798714	2.15171	0.637944	2.151708495	1.718600115	5.270306
Фрейндліха	35.24	1.885445	5.07932	3.554904	5.079324932	9.576789904	6.652946
Редліха-Петерсона	35.78	1.343486	3.61931	1.804956	3.619305986	4.862488304	0.351033
Ленгмюра-Фрейндліха	35.95	1.171207	3.15519	1.371725	3.155190114	3.695379392	1.612857
НВЧ-опромінений бентоніт – координати точки [146.3;54.9]							
Ленгмюра	56.02737293	1.127373	-2.0535	1.27097	2.053502606	2.315063251	4.323193
Фрейндліха	48.86942764	6.030572	10.9846	36.3678	10.98464911	66.24372131	4.329199
Редліха-Петерсона	48.86948399	6.030516	10.9845	36.36712	10.98454647	66.24248342	4.329085
Ленгмюра-Фрейндліха	55.79815121	0.898151	-1.636	0.806676	1.635976696	1.469354443	4.335091

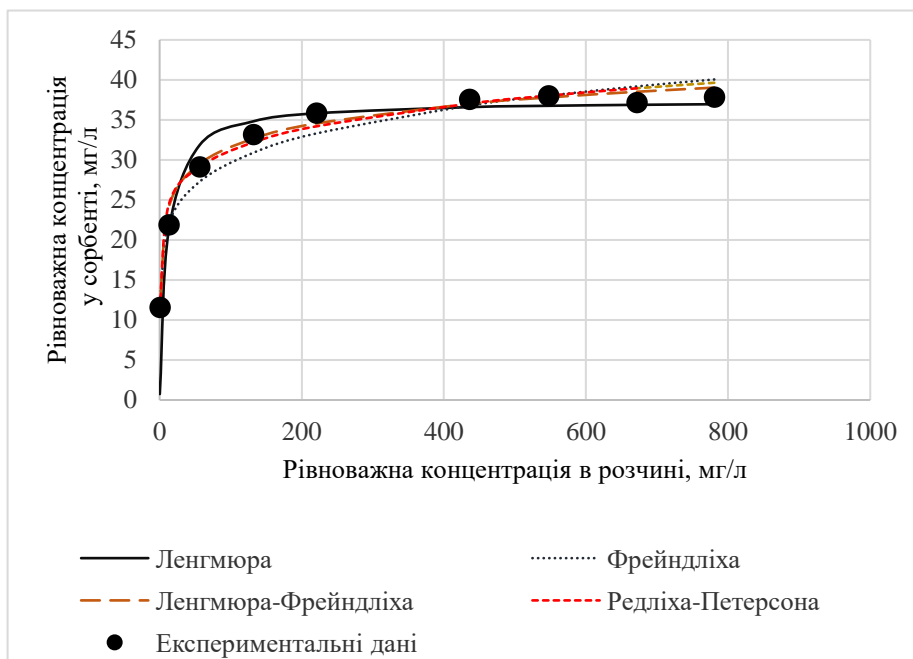


Рис. 1. Ізотерми адсорбції Феруму на природному бентоніті.

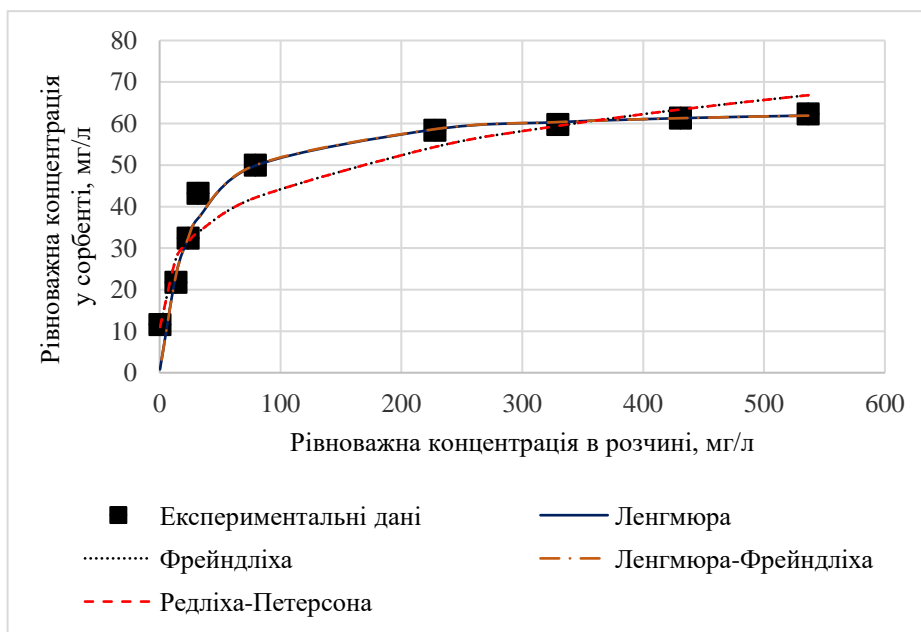


Рис. 2. Ізотерми адсорбції Феруму на НВЧ-опромінену бентоніті.

та/або гібридної фракційної похибки. Суттєвою перевагою цих функцій є врахування ступенів свободи.

Внаслідок порівняння отриманих SNE при моделюванні в рамках 4 теоретичних моделей дійшли висновку, що процес поглинання заліза на природному та модифікованому зразках найкраще описується за допомогою моделі Фрейндліха (табл. 1-4).

Натомість порівняння SNE, отриманої внаслідок розрахунку функцій похибок у випадку порівняння експериментального значення, що не використовувалось при моделюванні в рамках моделей адсорбції, з розрахунком за кожною із

обраних моделей (табл. 5), свідчить про те, що найкраще процес поглинання заліза на природному бентоніті описує трипараметрична модель Редліха-Петерсона (рис. 1), а на НВЧ-опромінену – ізотерма Фрейндліха (рис. 2). Модель Редліха - Петерсона об'єднує моделі центрів з одним і тим же сорбційним потенціалом [15]. Модель Фрейндліха застосовують для опису сорбції на гетерогенній поверхні. Оскільки сорбційні центри за цією моделлю володіють різними величинами енергії, то в першу чергу відбувається заповнення активних сорбційних положень з максимальною енергією [12]. Отже, можна припустити, що внаслідок модифікування бентоніту на його поверхні утворюються нові центри адсорбції.

Висновки

1. У стаціонарних умовах досліджено адсорбцію іонів феруму на природному на опромінену надвисокочастотним електромагнітним випромінюванням бентоніті. Побудовано ізотерми адсорбції, за допомогою яких визначено максимальну сорбційну ємність зразків, що складає 37,7 та 64,4 мг/г сорбенту, відповідно.

2. Експериментальні дані були опрацьовані методом нелінійного моделювання із застосуванням моделей Ленгмюра, Фрейндліха, Редліха-Петерсона та Ленгмюра-Фрейндліха. Визначено константи цих рівнянь. Показано, що найкраще процес поглинання заліза на природному бентоніті описує

трипараметрична модель Редліха-Петерсона, а на НВЧ-опромінену – ізотерма Фрейндліха.

3. НВЧ-опромінений зразок виявляє високу адсорбційну ємність щодо феруму і, таким чином, є перспективним матеріалом для очищення стічних вод. Стимуляція НВЧ є вигідною порівняно з хімічним модифікуванням, оскільки не вимагає додаткових реагентів та встановлення додаткової стадії обробки.

Степова К.В. – к.т.н., доцент, доцент кафедри екологічної безпеки;

Сиса Л.В. – к.х.н., доцент, доцент кафедри екологічної безпеки;

Конанець Р.М. – ад'юнкт кафедри екологічної безпеки, підполковник служби цивільного захисту.

- [1] P.B. Tchounwou et al., *Experientia Suppl.* 101, 133 (2012); https://doi.org/10.1007/978-3-7643-8340-4_6.
- [2] V. Popovych, A. Gapalo. *Ecol. Eng.* 22(5), 96 (2021); <https://doi.org/10.12911/22998993/135872>.
- [3] B. Kaźmierczak, J. Molenda, M. Swat, *Environ. Technol. Innov.* 23, 101737 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.eti.2021.101737>.
- [4] Y. Yuana, Zh. An, R. Zhang, X. Wei, B. Lai. *J. Clean. Prod.* 293, 126215 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.126215>.
- [5] E. Cerrahoğlu Kaçakgil, S. Çetintaş. *Sustain. Chem. Pharm.* 22, 100468 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.scp.2021.100468>.
- [6] R. Jayasree et al., *Chemosphere* 285, 131502 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.131502>.
- [7] L. Sysa, Yu. Rudyk, A. Kontsur, *Ecological Safety* 24, 45 (2017).
- [8] A. Kontsur, Yu. Rudyk, L. Sysa, Ya. Kyryliv, *Ecological Safety* 25, 38 (2018); <https://doi.org/10.30929/2073-5057.2018.1.38-45>.
- [9] L.V. Sysa, K.V. Stepova, M.A. Petrova, A.Z. Kontsur, *Issues of Chemistry and Chemical Technology* 5, 126 (2019); <https://doi.org/10.32434/0321-4095-2019-126-5-126-134>.
- [10] A. Kontsur, L. Sysa, M. Petrova, *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies* 6, 26 (2017); <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2017.116090>.
- [11] I. Langmuir, *J. Am. Chem. Soc.* 40, 1361 (1918); <https://doi.org/10.1021/ja02242a004>.
- [12] H.M.F. Freundlich, *Z. Phys. Chem.* 57, 385 (1906); <https://doi.org/10.1515/zpch-1907-5723>.
- [13] B. Al-Duri, G. McKay. *Chem. Eng. J.* 38, 23 (1988); [https://doi.org/10.1016/0300-9467\(88\)80050-9](https://doi.org/10.1016/0300-9467(88)80050-9).
- [14] H. Moon, W.K. Lee. *J. Colloid. Interface Sci.* 96(1), 162 (1983); [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(83\)90018-8](https://doi.org/10.1016/0021-9797(83)90018-8).
- [15] O. Redlich, D.L. Peterson, *J. Phys. Chem.* 63, 1024 (1959); <https://doi.org/10.1021/j150576a611>.
- [16] A.P. Matthews, W.J. Jr. Weber, *AIChE Symp. Ser.* 73, 91 (1976).
- [17] J.F. Porter, G. McKay, K.H. Choy, *Chem. Eng. Sci.* 54, 5863 (1999); [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(99\)00178-5](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(99)00178-5).
- [18] D.W. Marquardt, *J. Soc. Ind. App. Maths.* 11, 431 (1963); <https://doi.org/10.1137/0111030>.
- [19] A. Kapoor, R.T. Yang. *Gas Sep. Purif.* 3(4), 187 (1989); [https://doi.org/10.1016/0950-4214\(89\)80004-0](https://doi.org/10.1016/0950-4214(89)80004-0).

K. Stepova, L. Sysa, R. Konanets

Nonlinear Fitting of Iron Sorption on Bentonite to Theoretical Isotherm Models

Lviv State University of Life Safety, Lviv, Ukraine, e-mail: katvastepova@gmail.com

A comparative analysis of adsorption models application for the description of experimental isotherms of iron adsorption on two samples: natural bentonite and bentonite irradiated with microwave irradiation. Sorption isotherms are described using the theories of Langmuir, Freundlich, Redlich-Peterson and Langmuir-Freundlich. The constants and parameters of these equations are determined. Nonlinear fitting of experimental data to the theoretical models of isotherms showed that adsorption by native bentonite corresponds to the three-parameter Redlich-Peterson model, and microwave irradiated - to the Freundlich isotherm. This modeling allows to predict the maximum adsorption capacity, which is 37.7 mg/g of natural bentonite and 64.4 mg/g of the modified sample.

Keywords: bentonite, microwave, adsorption, iron, non-linear fitting.