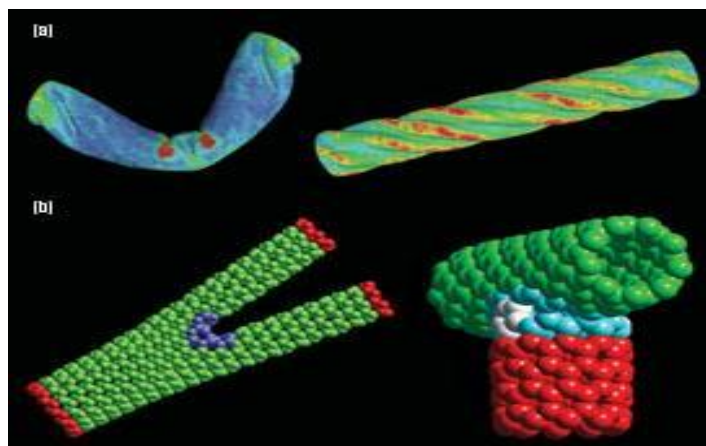


Vývoj metodiky modelování transportních a přírodních procesů při změně oxidačně - redukčních podmínek

„Migrace železných nanočástic“



Technická Univerzita v Liberci
Ústav nových technologií a aplikované informatiky
NTI



Vypracoval : Jaroslav Nosek

Školitel : Miroslav Černík

Dizertační práce

§ *Rozklad CHC pomocí nanočástic Fe^0 (nano Fe^0)*

§ *Laboratorní experimenty*

- n Třepací testy
- n Kolonové experimenty

§ *Matematické modelování*

- n Model migrace nano Fe^0 v Processing Modflow
- n Využití modelu pro optimalizaci sanačního zásahu při pilotní aplikaci nano Fe^0

Chemický rozklad kontaminantu

§ *Oxidační metody : Ozón, H_2O_2 , $KMnO_4$,*

n *Výhody:*

w rychlost, netoxický produkt, nevznikají odpady

n *Nevýhody :*

w nutnost zoxidovat celé prostředí

§ *Redukční metody : Laktát, Fe^0*

n *Výhody:*

w jako oxidační, navíc jsou selektivní => efektivnější

w šetrnější k okolí

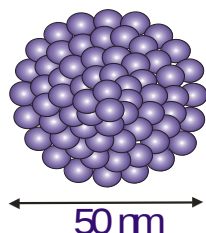
n *Nevýhody:*

w málo prozkoumané

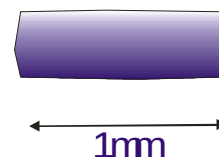
Nanočástice Fe^0

§ *Nano* →

- n Velký měrný povrch (vysoká reaktivita)
- n Možnost migrace



Nanočástice Fe^0
na povrchu cca 4 % atomů



Špona Fe^0
reaktivní brany PRB
na povrchu < 0,0001 % atomů

Částice Fe^0

- n reaktivní bariéry
- n nano Fe^0 : TCE, PCE, DDT, PCB, CPM, PCP, lindan, nitraty, Pb, Hg, Ni, Cd, Cr, As, TNT, U, (více jak 70 typů sloučenin (Zhang 2003))

Nanočástice Fe⁰

§ *Migrace nanočástic*

- n Brownův pohyb (molekulární difúze)
- n konvekční pohyb částic v proudu vody
- n sedimentace vlivem gravitace

→ optimální rozměr pod 100nm (*Zhang 2003*)

§ *Migrace nanočástic*

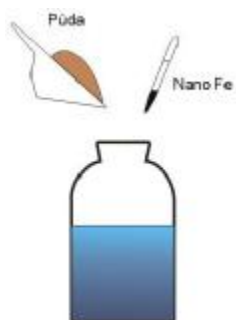
§ TODA

§ ZHANG

§ Olomoucké nanoFe⁰

Třepací testy

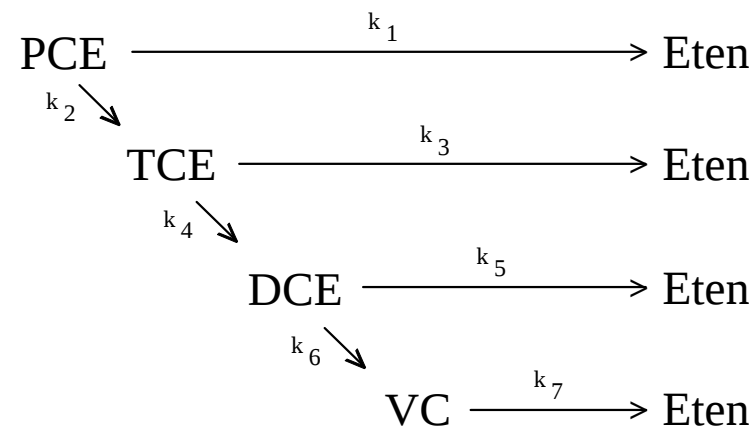
§ Metodika



- chemické analýzy
- měření koncentrací
CHC

§ Úkol

- n určit řád kinetiky reakce
→ 1.řád
- n porovnání použitých nanočástic
(TODA, ZHANG, OLOMOUC)



Kolonové testy

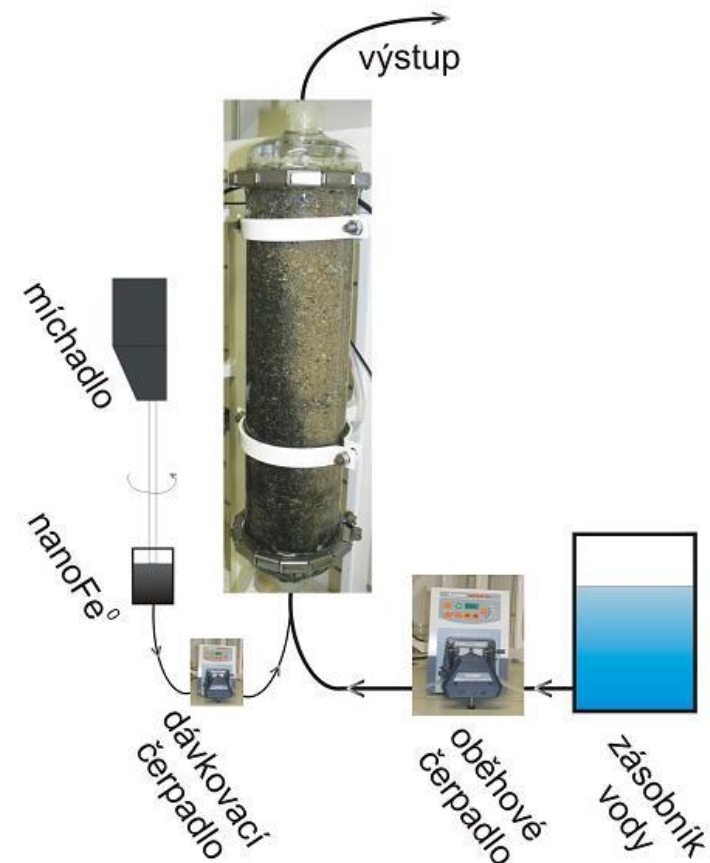
§ *Transport nanočástic horninovým prostředím*

- n vliv horninového prostředí
- n způsob infiltrace nanočástic

§ *Metodika*

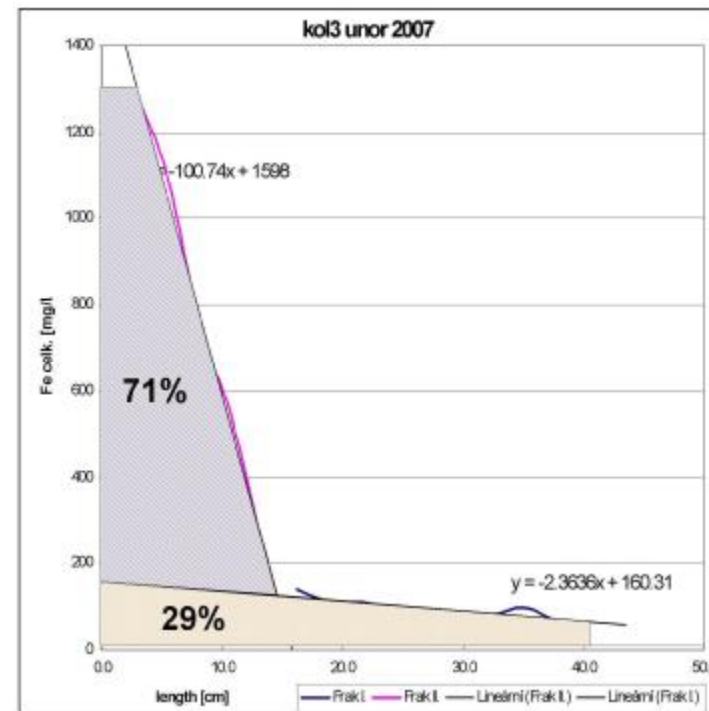
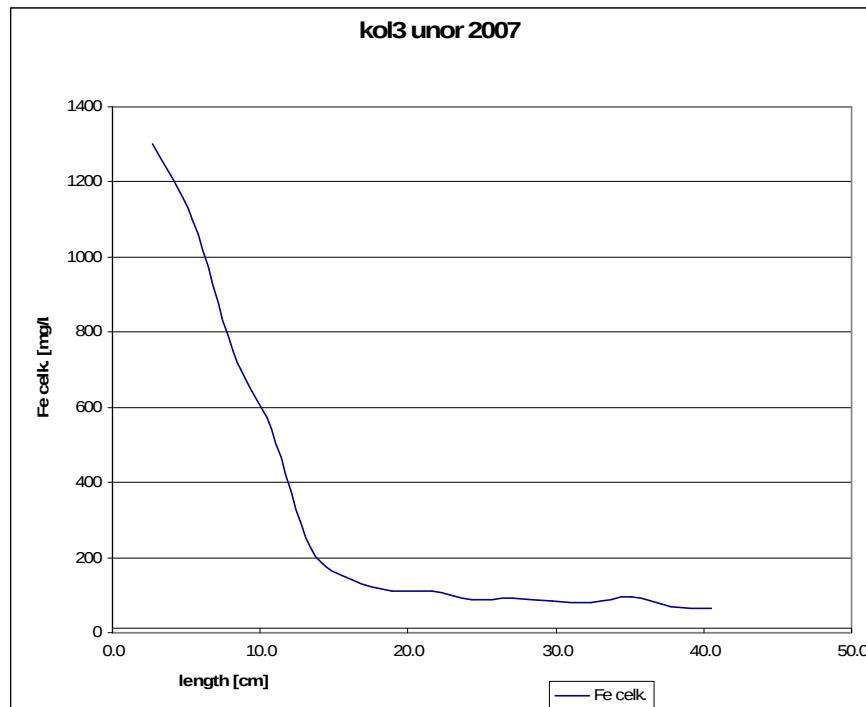
§ *Model migrace nanočástic*

- n PROCESSING MODFLOW
- n 1D model kolony
- n model lokality



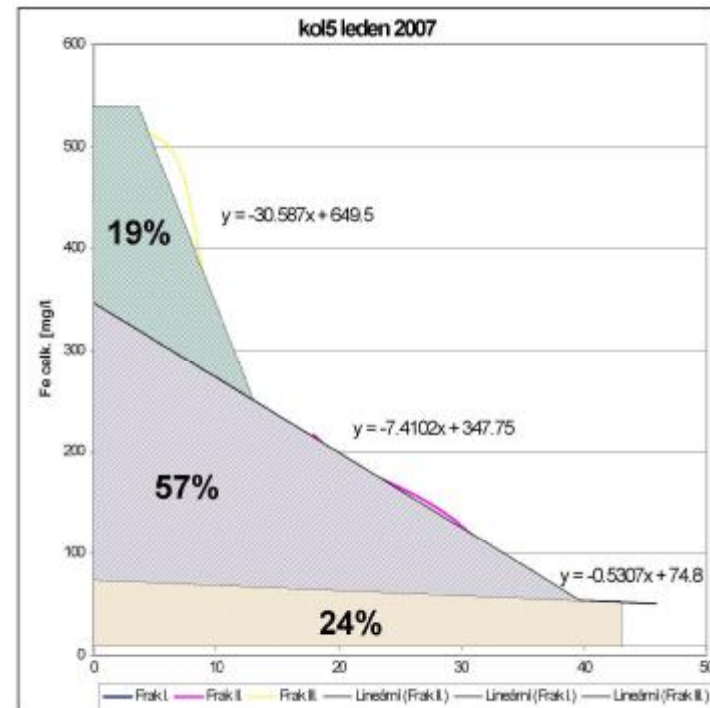
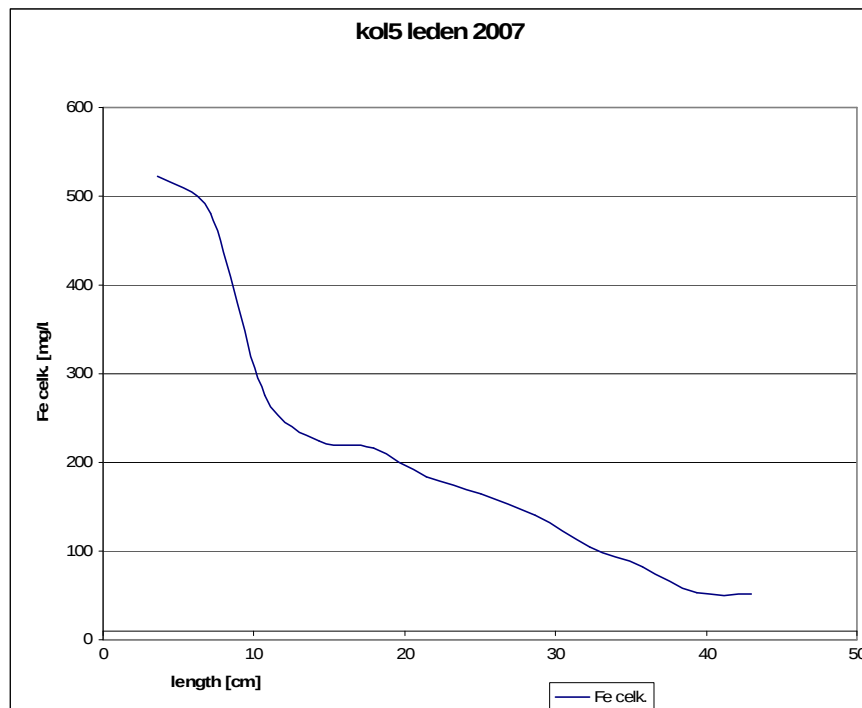
Kolonové testy

- n zasáknuté nanoFe⁰ má více frakcí
 - w jemnější (mobilnější) I.
 - w hrubší II.
 - w jemnější frakce postupně agreguje



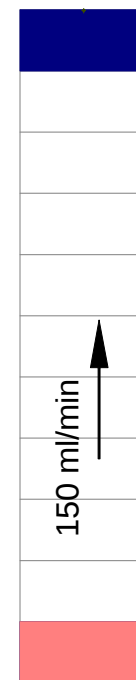
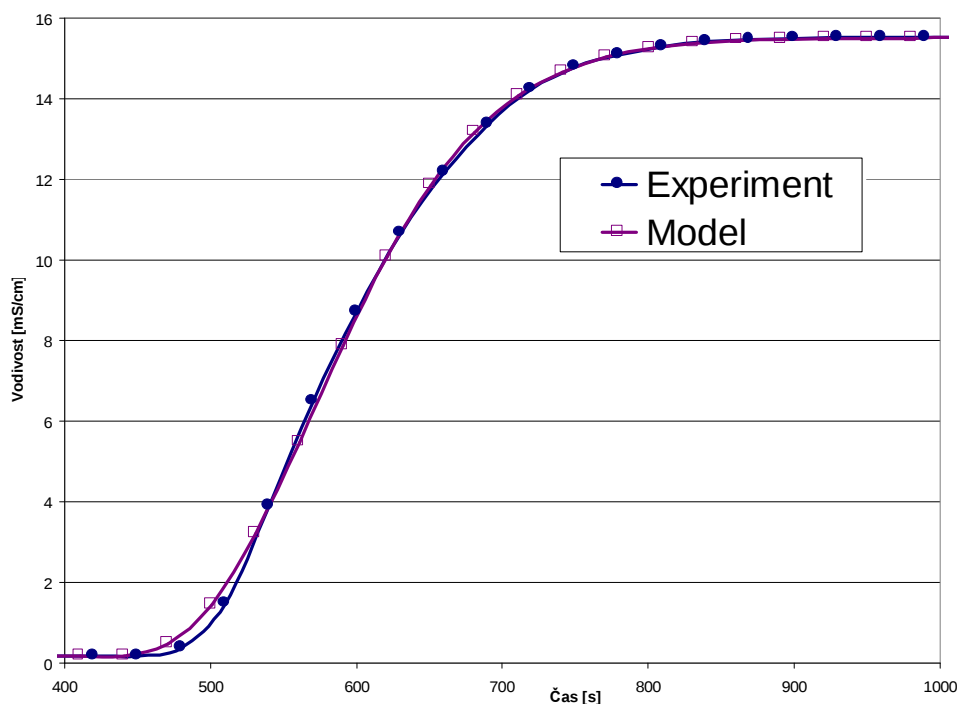
Kolonové testy

- n zasáknuté nanoFe⁰ má více frakcí
 - w jemnější (mobilnější) I.
 - w hrubší II.
 - w jemnější frakce postupně agreguje



Model kolony

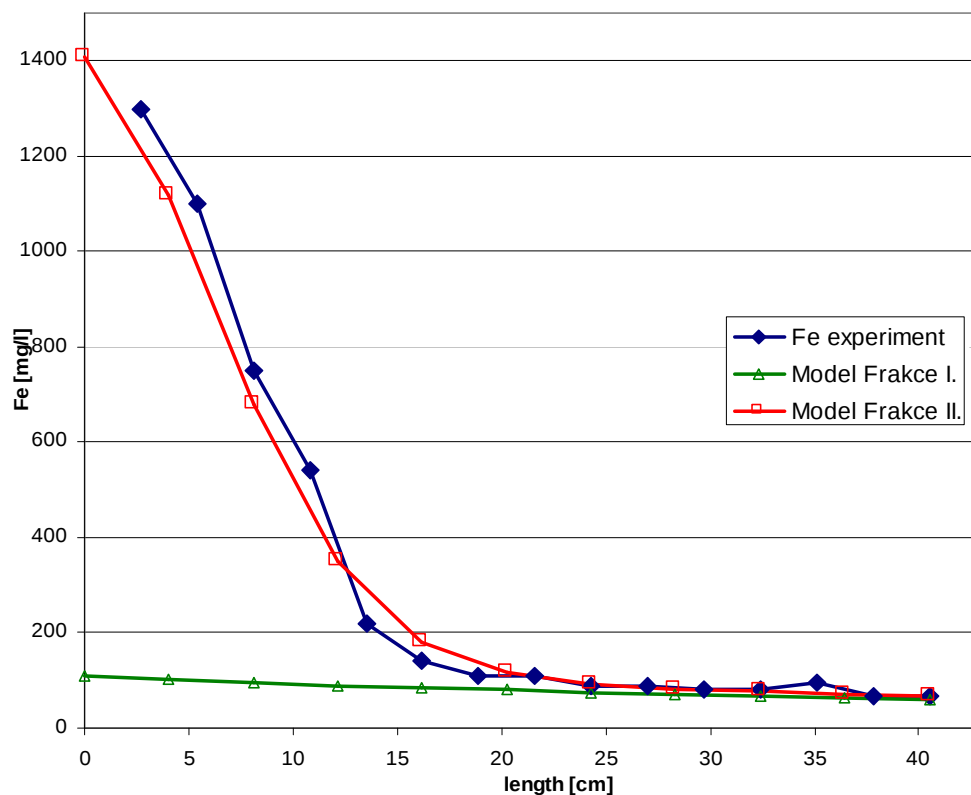
- proudový model kolony v PROCESSING MODFLOW PRO
- transport 2 frakcí nanoFe⁰ v modulu RT3D
- řešen jako 1D
- pouze numerická disperze



- kalibrace numerické disperze pomocí stop. zk.
- výsledný model 10 elementů

Model kolony

- model migrace nanoFe⁰ řešen pro 2 frakce
- agregace jemnější frakce řešena kinetikou 1. řádu
- modelově byly určeny distribuční koeficienty pro obě frakce



Látka	Distribuční koeficient K_d [cm ³ /g]	Agregace nanoFe ⁰ (kinetika 1.řádu) [s]
Frakce I.	0.5	0.0014
Frakce II.	35	0

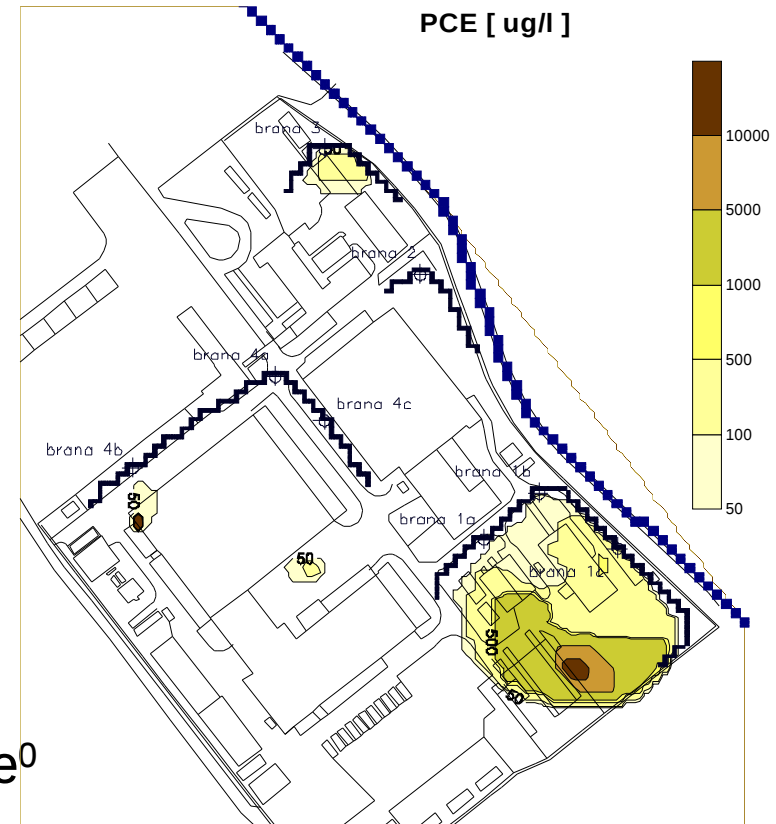
Modelování reálné situace

§ *Lokalita Hluk Nový Jičín*

- n pilotní test (použití nano Fe)
- n kontaminace CIU
- n podzemní těsnicí stěna

§ *Matematické modelování*

- n PROCESSING MODFLOW
- n model proudění
- n transportní model
- n využití modelu migrace nanoFe⁰



Konec.....