

REACTIVE TRANSPORT MODELING OF HEXAVALENT CHROMIUM TREATMENT BY ZERO VALENT IRON

Hexavalent chromium (Cr(VI)) is a toxic heavy metal used in various industries, posing risks to human health and the environment. Its reduction to less toxic trivalent chromium (Cr(III)) can be achieved through Permeable Reactive Barriers (PRBs), which are cost-effective systems for groundwater remediation. The geochemical processes governing Cr(VI) removal and the impact of secondary mineral formations on reactive media are not fully understood, and the modeling of the remediation process is still being developed. This study primarily focuses on modeling Cr(VI) removal process using ZVI with the geochemical modeling tool PHREEQC. The modeling study is based on experimental data previously published in the literature. The main objectives of this study are to: (1) develop a kinetic reaction network that includes passivation by secondary minerals, (2) examine the impact of secondary mineral formation on the reactive capacity of ZVI at different concentrations and flowrates, (3) perform a sensitivity analysis on input parameters, and (4) build prediction models to evaluate the effect of varying inlet Cr(VI) concentrations on removal performance. The results indicate that although ZVI remains in the system at the end of the simulations, its reactive surface area is fully depleted due to surface passivation and the effect of surface passivation diminishes as ZVI concentrations increase. Furthermore, the model predictions revealed that as the inlet Cr(VI) concentration increases, the remediated Pore Volumes (PVs) decrease exponentially.

The results of this modeling study provide insights into the geochemical processes affecting Cr(VI) removal, which can help enhance the design of iron-based PRB applications.

By: Rozeran Taşdelen

Supervisor: Asst. Prof. Dr. Sema Sevinç Şengör

Co-supervisor: Prof. Dr. Kahraman Ünlü

HEKZVALENT KROM'UN SIFIR DEĞERLİKLİ DEMİR İLE ARITILMASININ REAKTİF TAŞINIM MODELLEMESİ

Hekzavalent krom (Cr(VI)), çeşitli endüstrilerde kullanılan, insan sağlığına ve çevreye risk oluşturan toksik bir ağır metaldir. Daha az toksik olan üç değerlikli kroma (Cr(III)) indirgenmesi, yeraltı suyunun arıtılması için uygun maliyetli sistemler olan Geçirgen Reaktif Bariyerler (GRB'ler) aracılığıyla sağlanabilir. Cr(VI) giderimini yöneten jeokimyasal süreçler ve ikincil mineral oluşumlarının reaktif ortam üzerindeki etkisi tam olarak anlaşılmamıştır ve giderim sürecinin modellenmesi halen geliştirilmektedir. Bu çalışma öncelikle jeokimyasal modelleme aracı PHREEQC ile Sıfır Değerlikli Demir (Fe(0)) kullanılarak Cr(VI) giderme işleminin modellenmesine odaklanmaktadır. Modelleme çalışması daha önce literatürde yayınlanmış deneysel verilere dayanmaktadır. Bu çalışmanın temel amaçları şunlardır: (1) ikincil mineraller tarafından pasifleştirmeyi içeren bir kinetik reaksiyon ağı geliştirmek, (2) ikincil mineral oluşumunun farklı konsantrasyon ve akış hızlarında Fe(0)'ın reaktif kapasitesi üzerindeki etkisini incelemek, (3) girdi parametreleri üzerinde bir duyarlılık analizi ve (4) değişen giriş Cr(VI) konsantrasyonlarının giderme performansı üzerindeki etkisini değerlendirmek için tahmin modelleri oluşturmak.

Sonuçlar, simülasyon sonunda Fe(0)'ın sistemde bulunmasına rağmen, yüzey pasivasyonu nedeniyle reaktif yüzey alanının tamamen tükendiğini ve Fe(0) konsantrasyonları arttıkça yüzey pasivasyonunun etkisinin azaldığını göstermektedir. Ayrıca model tahminleri, girişteki Cr(VI) konsantrasyonu arttıkça arıtılan por hacminin üssel olarak azaldığını ortaya çıkarmaktadır. Bu modelleme çalışmasının sonuçları, Cr(VI) giderimini etkileyen jeokimyasal süreçler hakkında bilgi sağlamaktadır ve bu da demir bazlı PRB uygulamalarının etkinliğinin artırılmasına yardımcı olabilir.

Sunucu: Rozeran Taşdelen

Danışman: Assist. Prof. Dr. Sema Sevinç Şengör

Eş danışman: Prof. Dr. Kahraman Ünlü