



دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر  
فصلنامه‌ی کاربرد شیمی در محیط زیست

سال دوازدهم، شماره‌ی ۴۶  
تابستان ۱۴۰۰، صفحات ۶۱-۵۵

## مطالعه ایزوترم و سینتیک جذب سطحی حذف ۴-نیتروفنل از محلول های آبی بر روی نانو الیاف کربنی

پروین غربانی

گروه شیمی، واحد اهر، دانشگاه آزاد اسلامی، اهر، ایران

[parvingharbani@iau.ac.ir](mailto:parvingharbani@iau.ac.ir)

دریافت: ۱۴۰۱/۰۳/۲۴ بازنگری: ۱۴۰۱/۰۳/۰۷ پذیرش نهایی: ۱۴۰۱/۰۳/۱۱

### چکیده

ترکیبات نیتروفنلی و رنگ‌های سمی از آلاینده‌های اصلی فاضلاب صنایع مختلف محسوب می‌شوند. این ترکیبات آلی مصنوعی بسیار سمی و یکی از مقاوم‌ترین آلاینده‌ها در محیط زیست هستند. توسعه یک روش ساده و موثر برای از بین بردن آلاینده‌های تجزیه‌ناپذیر به محصولات غیرخطرناک یکی از چالش‌های اصلی در مطالعات زیست‌محیطی است. هدف اصلی این تحقیق حذف ترکیب ۴-نیتروفنل از محلول‌های آبی با استفاده از نانو الیاف کربنی می‌باشد. پارامترهای موثر بر حذف ۴-نیتروفنل از محلول‌های آبی مطالعه شد و شرایط بهینه جذب ۴-نیتروفنل pH مساوی ۲ و مقدار ۰/۰۲ گرم از نانو الیاف کربنی در مدت زمان تعادلی ۸۰ دقیقه حاصل شد. نتایج نشان داد که کارایی حذف ۴-نیتروفنل با افزایش غلظت ۴-نیتروفنل افزایش می‌یابد و با افزایش مقدار نانو الیاف کربنی و pH کاهش می‌یابد. بر اساس ضرایب همبستگی، ایزوترم لانگمویر تطبیق مناسبی با جذب بر روی نانو الیاف کربنی نشان داد. معادلات سینتیکی نیز نشان داد که جذب ۴-نیتروفنل بر روی نانو الیاف کربنی از سینتیک شبه مرتبه دوم تبعیت می‌کند.

**کلید واژه:** ۴-نیتروفنل، نانو الیاف کربنی، سینتیک، ایزوترم.

## مقدمه

تغییرات غلظت ۴- نیتروفلن در طول زمان نسبت به پارامترهای مختلف نظیر دوز جذب (۰/۰۲، ۰/۰۴، ۰/۰۶ گرم)، pH اولیه (۲، ۴، ۶، ۸، ۱۰) و غلظت اولیه رنگ (۲، ۴، ۶ و ۸ میلی گرم در لیتر) مورد ارزیابی قرار گرفت. محلول مادر از انحلال مقدار مناسبی از ترکیب ۴- نیتروفلن در اتانول تهیه شد و سپس با استفاده از آب مقطر، محلول‌هایی با غلظت مورد نظر بدست آمد. جهت تنظیم pH محلول‌ها از HCl و NaOH ۰/۱ نرمال استفاده شد. فرآیند جذب سطحی، با افزودن مقدار مناسبی از نانوالیاف کربنی در ۱۰۰ میلی لیتر از محلول ۴- نیتروفلن با غلظت و pH معین دنبال شد و مخلوط حاصل به کمک هم زن مغناطیسی هم زده شد. در طول فرآیند و در فواصل زمانی معین نمونه برداری از ظرف انجام شد. پس از صاف شدن با استفاده از دستگاه اسپکتروفوتومتر (UV-Vis مدل 5000 DR شرکت HACH)، مقدار جذب محلول صاف شده در طول موج ماکزیمم غلظت ۴- نیتروفلن با استفاده از نمودار کالیبراسیون محاسبه شد. برای تعیین درصد حذف ۴- نیتروفلن از رابطه (۱) استفاده شد:

$$\text{Adsorption (\%)} = \frac{(C_0 - C_t)}{C_0} \times 100 \quad (1)$$

در این رابطه  $C_0$  و  $C_t$  به ترتیب؛ غلظت اولیه و غلظت محلول در لحظات مختلف (mg/L) می‌باشد.

## نتایج و بحث

- اثر مدت زمان تماس

برای بررسی اثر مدت زمان تماس در فرآیند جذب سطحی ۴- نیتروفلن از محلول آبی بر روی نانوالیاف کربنی، ۰/۰۲ g از نانوالیاف کربنی به ۱۰۰ mL از محلول ۴- نیتروفلن با غلظت ۸ mg/L و pH=۲ اضافه شد. مخلوط حاصل به مدت ۱۲۰ دقیقه بر روی دستگاه شیکر هم زده شد و در فواصل زمانی ۱۰ دقیقه نمونه برداری از آن انجام گرفت که نتایج حاصل در شکل (۱) ارائه شده است.

آلودگی‌های آلی ممکن است از منابع مختلفی از جمله تخلیه نادرست پساب خروجی صنایع شیمیایی مانند صنعت پتروشیمی، پسماندهای صنعتی، کارخانه‌های داروسازی و انواع آفت کش‌های کشاورزی وارد آب شوند. از جمله این آلاینده‌ها می‌توان به پساب‌های خروجی از صنایع غذایی و سموم کشاورزی اشاره کرد. [۱-۴]. یکی از این ترکیبات آروماتیکی ۴- نیتروفلن است که در پساب صنایع سموم کشاورزی موجود بوده و روزانه مقدار زیادی از آن وارد آب‌های زیرزمینی می‌شود. از آن جایی که این ترکیب سرطان زا می‌باشد لذا نیازمند حذف از محیط می‌باشد. بنابراین لزوم تصفیه پساب خروجی واحدهای مختلف صنایع تولید کننده این مواد آلی ضروری است. برای حذف آلاینده‌های آلی از روش‌های متفاوتی استفاده شده است که از آن جمله می‌توان به روش اکسیداسیون پیشرفته، بیولوژیکی، الکتروشیمیایی و جذب سطحی اشاره کرد [۵-۸]. در این میان فرآیند جذب سطحی با توجه به عملکرد ساده، راندمان بالا، هزینه پایین و قابلیت حذف گسترده وسیعی از ترکیبات شیمیایی به عنوان یک روش اقتصادی و کارآمد محسوب می‌شود [۹-۱۰].

در این تحقیق در نظر است ایزوترم و سینتیک جذب سطحی حذف ۴- نیتروفلن از محلول‌های آبی بر روی نانوالیاف کربنی مورد ارزیابی قرار گیرد.

## مواد و روش‌ها

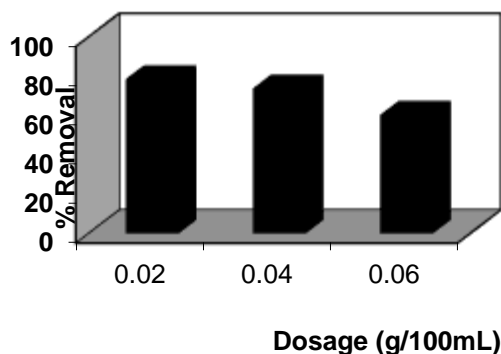
- مواد

نانوالیاف کربنی با قطر ۲۰۰ نانومتر و طول ۲۰-۱۰ میکرومتر از شرکت Showa Denko خریداری شد. ترکیب ۴- نیتروفلن [4NP] با وزن مولکولی ۱۳۹/۱۱ g/mol از شرکت Fluca خریداری شد. سایر مواد مصرفی محصول شرکت مرک بودند.

- روش جذب سطحی

آزمایشات جذب سطحی ۴- نیتروفلن از محلول‌های آبی بر روی نانوالیاف کربنی به روش ناپیوسته انجام شد.

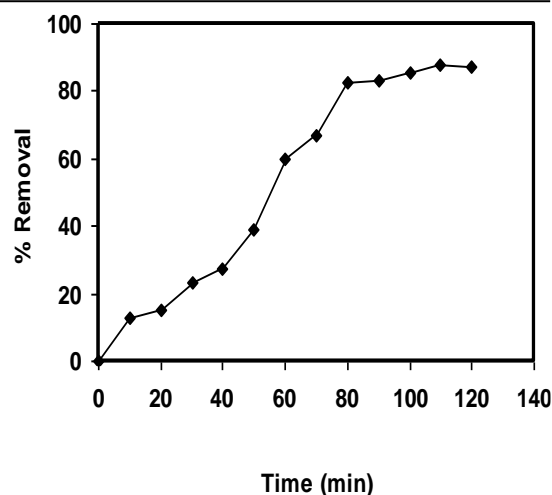
به نظر می‌رسد با افزایش مقدار نانو الیاف کربنی، نانو الیاف به هم چسبیده و درگیر خود می‌شوند. لذا میزان جذب ۴-نیتروفنل با افزایش مقدار نانوالیاف کربنی کاهش می‌یابد [۱۲].



شکل ۲: اثر مقدار نانوالیاف کربنی  
[4NP]<sub>0</sub>=8 mg/L; pH=2

#### - اثر مقدار pH

به منظور بررسی اثر pH محلول در میزان حذف ۴-نیتروفنل، محلول‌هایی با pH برابر ۲، ۴، ۶، ۸، ۱۰ با هیدروکلریک اسید و سدیم هیدروکسید و به کمک دستگاه pH متر تهیه شد. در این مرحله pH محلول به عنوان تنها متغیر آزمایش بوده و آزمایشات با ثابت در نظر گرفتن سایر پارامترها (۱۰۰ mL محلول ۴-نیتروفنل با غلظت ۸ mg/L، ۰/۰۲ g نانوالیاف کربنی انجام شد. (شکل ۳). با توجه به شکل (۳) ملاحظه می‌شود که راندمان جذب سطحی ترکیب 4NP توسط نانوالیاف کربنی در pH های اسیدی، بیش تر از محیط‌های قلیایی و خنثی است، که دلیل این امر را به برهمکنش‌های الکترواستاتیکی بین سطح جاذب و ذرات جذب شونده می‌توان نسبت داد [۱۳].



شکل ۱: بررسی اثر زمان تماس  
[4NP]<sub>0</sub>=8 mg/L; [CNF]=0.02gr/100 mL; pH=2

با توجه به شکل (۱) مقدار جذب ۴-نیتروفنل بر روی نانو الیاف کربنی، رفته رفته افزایش یافته و بعد از زمان ۸۰ دقیقه به حالت ثابتی می‌رسد. با توجه به اینکه هر جاذب در برابر یک جذب شونده مشخص دارای تعداد معینی مکان جذب بوده و روی هر مکان جذب، فقط یک مولکول جذب شونده، جذب شده و یک جذب تک لایه ای نامتحرک را به وجود می‌آورد. بنابراین پس از جذب یک لایه از جذب شونده روی جاذب، دیگر جذبی صورت نخواهد گرفت و فرآیند به حالت پایداری خواهد رسید. با توجه به نتایج بدست آمده، مدت زمان تماس تا ۸۰ دقیقه در نظر گرفته و بقیه آزمایشات از این به بعد تا دقیقه ۸۰ مورد بررسی قرار گرفته است [۱۱].

#### - اثر دوز جاذب

به منظور اثر دوز جاذب در جذب سطحی ۴-نیتروفنل، آزمایشات در حضور مقادیر مختلفی از نانوالیاف کربنی (۰/۰۲، ۰/۰۴، ۰/۰۶ گرم) انجام شد که نتایج حاصل در شکل (۲) نشان داده شده است. با توجه به شکل (۲) مشاهده می‌شود که با افزایش دوز جاذب از ۰/۰۲ تا ۰/۰۶ g، میزان جذب ۴-نیتروفنل روی جاذب کاهش یافته است.

### - ایزوترم‌های جذب سطحی

روابط حاصل از مقدار ماده جذب شده بر سطح یک جامد در دمای مشخص، بیانگر چهارچوب برای توصیف پیشرفت جذب و داده‌های ایزوترمی در سه مدل لانگمیر، تمکین و فروندلیچ رسم می‌شود و بر اساس ضریب ریگراسیون خطوط مدل ایزوترمی آن تعیین می‌شود.

شکل عمومی ایزوترم لانگمیر بصورت رابطه زیر است:

$$\frac{1}{q_e} = \left( \frac{1}{K_L q_m} \right) \frac{1}{C_e} + \frac{1}{q_m} \quad (2)$$

$q_e$  مقدار ماده جذب شده به ازای واحد جرم جاذب در حالت تعادل (mg/g)،  $C_e$  و  $q_m$  به ترتیب، غلظت تعادلی محلول (mg/L) و مقدار ماده جذب شده به ازای واحد جرم جاذب برای تکمیل پوشش تک لایه‌ای یا حداکثر ظرفیت جذبی جاذب (mg/g) می‌باشد.  $K_L$  ثابت تعادل جذب سطحی با واحد L/mg است که تمایل اتصال جذب شونده بر روی سطح جاذب را نشان می‌دهد [۱۵].

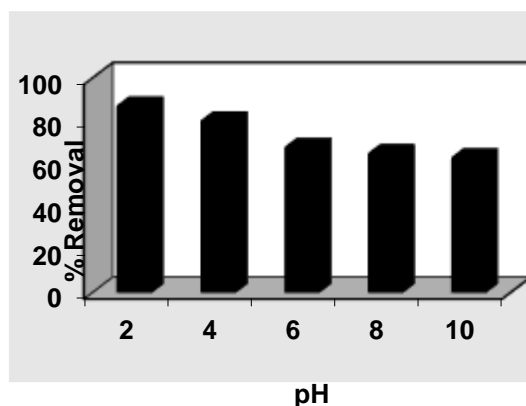
تغییرات جذب با فشار را (بخصوص در فشارهای متوسط تا کم) می‌توان با معادله ی زیر که فریندلیچ پیشنهاد کرده است، نشان داد [۱۶]:

$$\text{Ln}q_e = \frac{1}{n} \text{Ln}C_e + \text{Ln}K_F \quad (3)$$

در رابطه فوق،  $q_e$  و  $C_e$  مشابه موارد مطرح شده در رابطه لانگمیر است.  $K_F$  و  $n$  ثابت‌های ایزوترم فروندلیچ هستند که  $K_F$  با ظرفیت جذب سطحی بر حسب  $(\text{mg/g})(\text{L/mg})^{1/n}$  در ارتباط است و  $n$  تمایل به جذب سطحی را نشان می‌دهد [۱۷].

ایزوترم تمکین، بیش‌تر برای فرآیند جذب سطحی شیمیایی که بصورت تک لایه‌ای تشکیل می‌شود کاربرد دارد. همچنین، این ایزوترم برای جاذب‌هایی که مکان‌های جذبی در آن‌ها از نظر انرژی با هم برابر نیستند مناسب است.

$$q_e = B_1 \text{Ln}C_e + B_1 \text{Ln}K_f \quad (4)$$

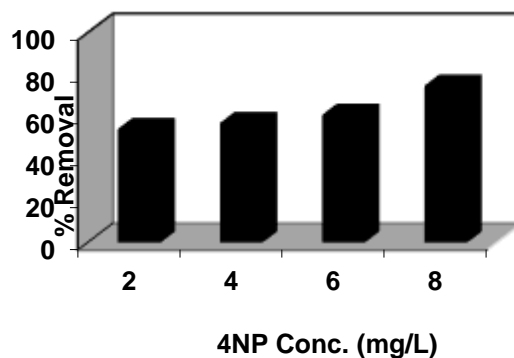


شکل ۳: اثر pH

[4NP]<sub>0</sub>=8 mg/L; [CNF]=0.02gr/100 mL

### - اثر غلظت اولیه رنگ

به منظور بررسی اثر غلظت اولیه ۴- نیتروفل در جذب سطحی آن بر روی نانوالیاف کربنی، این مرحله از آزمایشات در غلظت‌های مختلفی از محلول ۴- نیتروفل (۲، ۴، ۶ و ۸ میلی‌گرم در لیتر) انجام شد. به طوری که ۰/۰۲ گرم از نانوالیاف کربنی به ۱۰۰ میلی‌لیتر از محلول ۴- نیتروفل با غلظت معلوم، در pH=۲ افزوده شد و نتایج حاصل مورد ارزیابی قرار گرفت. مطابق شکل (۴) با افزایش غلظت ۴- نیتروفل، مقدار جذب افزایش می‌یابد. در واقع افزایش غلظت اولیه جذب شونده موجب افزایش برهم کنش‌های جاذب - جذب شونده می‌شود که این خود دلیلی بر افزایش میزان جذب سطحی با افزایش غلظت اولیه جذب شونده است [۱۴].



شکل ۴: اثر غلظت اولیه ۴- نیتروفل

[ [CNF]=0.02gr/100 mL; pH=2

## - سینتیک جذب سطحی

سینتیک جذب، بیانگر روند تغییرات ظرفیت جذبی یک جذب در طول زمان است که شناسایی این روند، جهت تعیین نوع مکانیسم فرآیند جذب در یک سیستم داده شده بسیار مفید خواهد بود. به منظور توصیف رفتار سینتیک جذب سطحی، چندین مدل سینتیکی از جمله مدل های شبه مرتبه اول و شبه مرتبه دوم پیشنهاد شده است.

برای مطالعه سینتیک جذب سطحی آبی متیلن بر روی نانوالیاف کربنی، از نتایج آزمایش تعیین اثر مدت زمان تماس بر روی فرآیند جذب سطحی استفاده شد.

مدل شبه مرتبه اول که جهت توصیف تئوری جذب سطحی گونه های انحلال پذیر بکار برده شد، بصورت رابطه زیر است:

$$\frac{dq_t}{dt} = k_1(q_e - q_t) \quad (5)$$

در این رابطه  $q_e$  و  $q_t$  به ترتیب، مقدار ماده جذب شده در زمان  $t$  و زمان تعادل برحسب  $mg/g$  و  $k_1$  ثابت سرعت مدل شبه مرتبه اول با واحد  $min^{-1}$  است. انتگرال گیری از رابطه (۵) در شرایط مرزی  $t=0$  تا  $t=t$  و  $q_t=0$  تا  $q_t=q_t$  معادله (۶) را می دهد:

$$\ln(q_e - q_t) = -k_1 t + \ln q_e \quad (6)$$

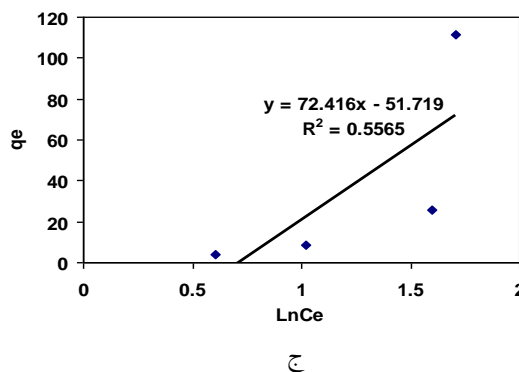
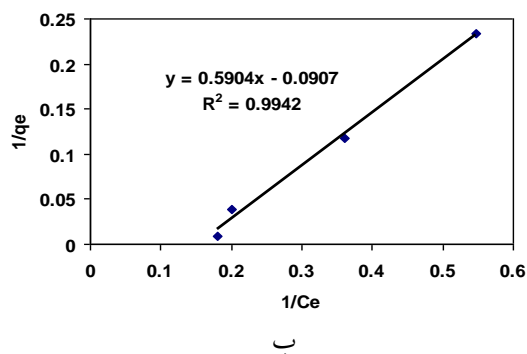
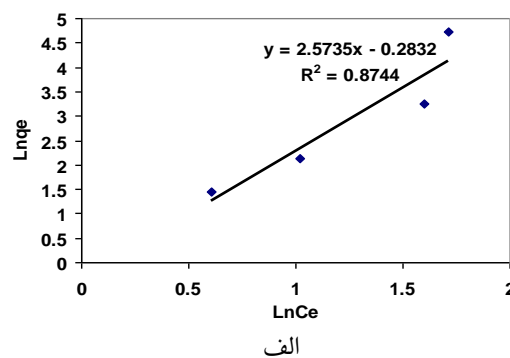
خطی شدن نمودار  $\ln(q_e - q_t)$  نسبت به  $t$ ، دلیل برقراری مدل سینتیکی شبه مرتبه اول است که در این صورت،  $k_1$  از شیب خط محاسبه می شود [۱۹].

مدل سینتیکی شبه مرتبه دوم؛ بصورت رابطه زیر بیان می - شود:

$$\frac{dq_t}{dt} = k_2(q_e - q_t)^2 \quad (7)$$

$q_e$  و  $q_t$  مشابه موارد مطرح شده در مدل شبه مرتبه اول و  $k_2$  ثابت سرعت مدل شبه مرتبه دوم با واحد  $g/(mg \cdot min)$  است.

در این روابط،  $q_e$  و  $C_e$  مشابه موارد مطرح شده در رابطه لانگمویر و فروندلیچ بوده و  $B_1 = RT/b$  ثابتی است که به گرمای جذب سطحی بستگی دارد.  $K_T$  ثابت پیوند تعادلی و یا ثابت ایزوترم تمکین با واحد  $L/g$  است [۱۸].



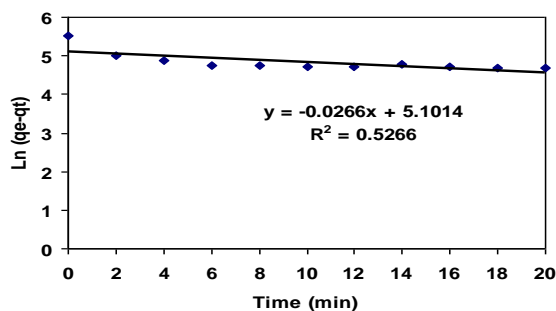
شکل ۵: نمودار ایزوترم های (الف) لانگمویر (ب) فروندلیچ (ج) تمکین در جذب سطحی ۴-نیتروفلن

با توجه به مقدار ضریب همبستگی ( $R^2$ ) نمودارهای رسم شده (شکل ۵)، جذب سطحی ترکیب ۴-نیتروفلن بر روی نانوالیاف کربنی از ایزوترم لانگمویر تبعیت می کند که می - تواند بیانگر تک لایه ای بودن جذب ۴-نیتروفلن بر روی سطح نانوالیاف کربنی باشد.

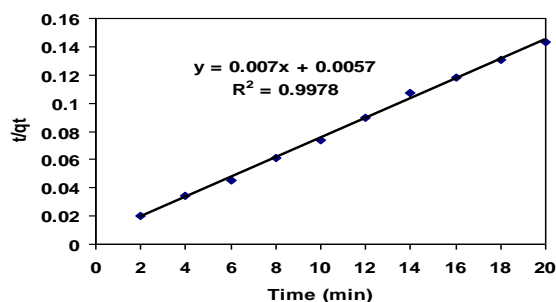
از انتگرال‌گیری رابطه (۷) در شرایط مرزی  $t=0$  تا  $t=t$  و  $q_t=0$  تا  $q_t=q_e$  معادله (۸) حاصل می‌شود:

$$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{k_2 q_e^2} + \frac{1}{q_e} t \quad (8)$$

خطی شدن نمودار  $t/q_t$  نسبت به  $t$  دلیل برقراری مدل سینتیکی شبه مرتبه دوم است که در این صورت  $k_2$  از عرض از مبدأ خط رسم شده محاسبه می‌شود [۲۰].  
خاطر نشان می‌شود که جهت برقراری مدل سینتیکی شبه مرتبه اول و دوم، افزون بر خطی شدن نمودارها باید مقدار  $q_e$  محاسبه شده از روابط ( $q_{e,cal}$ ) با مقدار  $q_e$  بدست آمده از آزمایشات ( $q_{e,exp}$ ) همخوانی داشته باشد.



الف



ب

شکل ۶: نمودارهای سینتیک (الف) شبه مرتبه اول (ب) شبه مرتبه دوم در جذب سطحی ۴-نیتروفنل

### نتیجه‌گیری

در مطالعه حاضر، قابلیت استفاده از نانوالیاف کربنی در فرآیند جذب سطحی ۴-نیتروفنل، به عنوان یکی از پساب‌های صنایع پتروشیمی، صنایع تولید رزین و پلاستیک که حضور آن در پساب‌های خروجی از چنین صنایعی غیرقابل اجتناب است، مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفته است. تلاش برای بدست آوردن شرایط بهینه و مناسب جهت جذب ۴-نیتروفنل بر روی سطح جاذب انجام شد. نتایج نشان داد که زمان ۸۰ دقیقه به عنوان لحظه تعادل در آزمایشات جذب ۴-نیتروفنل بر روی سطح جاذب می‌باشد. بررسی اثر مقدار جاذب نشان داد که در لحظات اولیه زمان تماس، ۴-نیتروفنل با سرعت انجام شده است اما با افزایش زمان، افزایش جذب به طور ملایم تری انجام شده است. در دقایق اولیه فرآیند، محل‌های موجود بر روی جاذب به سرعت با ماده جذب شونده برخورد کرده و سبب جذب آن می‌شود و با کم شدن جایگاه‌های جذب سطحی، ۴-نیتروفنل به صورت چند لایه‌ای و یا به صورت نفوذ به حفره‌های درونی جاذب، جذب می‌شود و این عمل سبب کم شدن سرعت جذب می‌شود. از بررسی اثر pH در فرآیند جذب سطحی معلوم شد که pH‌های اسیدی، بهتر از pH‌های قلیایی و خنثی می‌باشد. همچنین مطالعه تاثیر غلظت اولیه نشان داد که با افزایش غلظت اولیه ۴-نیتروفنل، میزان جذب سطحی آن بر روی جاذب رفته رفته افزایش می‌یابد. ضریب همبستگی خطی لانگمویر، فروندلیچ و ایزوترم تمکین محاسبه شد براساس نتایج بدست آمده مدل ایزوترم لانگمویر بهتر از مدل‌های ایزوترم دیگر بود. جذب سینتیک داده‌ها نشان داد که مدل شبه مرتبه دوم مناسب‌ترین مدل، توصیف سینتیک جذب است.

### منابع

- [1]. Ouardi, M.E, Laabd, M., Oualid, H.A., Brahmi, Y., Abaamrane, A., Elouahli, A., Addi, A. A., Laknifli, A., 2019, Efficient removal of p nitrophenol from water using montmorillonite clay: insights into the adsorption mechanism, process optimization, and regeneration, Environ. Sci. Pollut. Res. 26, 19615–19631.

از مقایسه ضریب همبستگی ( $R^2$ ) مدل‌های ارائه شده، نتیجه می‌شود که سینتیک جذب سطحی ۴-نیتروفنل بر روی نانوالیاف کربنی از مدل شبه مرتبه دوم ( $R^2 > 0/9$ ) با ثابت سرعت ( $0/076 \text{ min}^{-1}$ ) پیروی می‌کند.

- [2] Mustapha, S., Ndamitso, M., Abdulkareem, A., Tijani, J., Mohammed, A., Shuaib, D., 2019, Potential of using kaolin as a natural adsorbent for the removal of pollutants from tannery wastewater, *Heliyon* 5, e02923.
- [3] Rao, W., Piliouras, P., Wang, X., Guido, A., Kugler, K., Sieren, B., Wang, L., Lv, G., Li, Z., 2020, Zwitterionic dye rhodamine b (RhB) uptake on different types of clay minerals, *Appl. Clay Sci.* 197, 105790.
- [4] Han, Y., Liu, W., Chen, J., 2016, DFT simulation of the adsorption of sodium silicate species on kaolinite surfaces, *Appl. Surf. Sci.* 370, 403–409.
- [5] Chen, J., fei Min, F., Liu, L., Liu, C., Lu, F., 2017, Experimental investigation and DFT calculation of different amine/ammonium salts adsorption on kaolinite, *Appl. Surf. Sci.* 419, 241–251.
- [6] Kaolinite, A., 2012, cheap alternative for industrial and mining wastewater treatment, in: Z.M. Magriotis, R.M. Papini, P.R.M. Viana, P.F. Sales, O.M.S. Rodrigues (Eds.), *Application of Adsorbents for Water Pollution Control*, BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS, pp. 272–290.
- [7] Johnson, E.R., 2012, A. Otero-de-la Roza, Adsorption of organic molecules on kaolinite from the exchange-hole dipole moment dispersion model, *J. Chem. Theor. Comput.* 8.
- [8] Rodrigues, A.M., Palheta-Júnior, A.R., Pinheiro, M.S.S., Marinho, A.M.R., Chaves-Neto, A.M. J., Gester, R., Andrade-Filho, T., 2020, Encapsulation ability of silicon carbide and boron nitride nanotubes for spilanthal molecule, *J. Nanostruct. Chem.* 11, 203-2013.
- [9] Wang, X., Qian, P., Song, K., Zhang, C., Dong, J., 2013, The DFT study of adsorption of 2,4- dinitrotoluene on kaolinite surfaces, *Computat. Theor. Chem.* 1025, 16–23.
- [10] Pimenta, A.C.M., Andrade-Filho, T., Manzoni, V., Nero, J.D., Gester, R., 2019, Giant values obtained for first hyperpolarizabilities of methyl orange: a DFT investigation, *Theor. Chem. Acc.* 138.
- [11] Hohenberg, P.P., Kohn, W., 1964, Inhomogeneous electron gas, *Phys. Rev.* 136 , B864–B871.
- [12] Yue, Q., Shao, Z., Chang, S., Li, J., 2013, Adsorption of gas molecules on monolayer MoS<sub>2</sub> and effect of applied electric field, *Nanoscale Res. Lett.* 8, 425.
- [13] Dion, M., Rydberg, H., Schröder, E., Langreth, D.C., Lundqvist, B.I., 2004, Van der waals density functional for general geometries, *Phys. Rev. Lett.* 92.
- [14] Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., 2010.
- [15] Heyd, J., Scuseria, G.E., Ernzerhof, M., 2003, Hybrid functionals based on a screened coulomb potential, *J. Chem. Phys.* 118, 8207–8215.
- [16] He, C., Han, F.S., Zhang, J.H., Zhang, W.X., 2020, The in<sub>2</sub>ses/g-c<sub>3</sub>n<sub>4</sub>heterostructure: a new two-dimensional material for photocatalytic water splitting, *J. Mater. Chem.* C8, 6923-6930.
- [17] He, C., Zhang, J.H., Zhang, W.X., Li, T.T., 2019, Type-II InSe/g-c<sub>3</sub>n<sub>4</sub> heterostructure as a high-efficiency oxygen evolution reaction catalyst for photoelectrochemical water splitting, *J. Phys. Chem. Lett.* 10, 3122–3128.
- [18] Desiraju, G.R., Steiner, T., 1999, *The Weak Hydrogen Bond : in Structural Chemistry and Biology*, Oxford University Press, Oxford New York.
- [19] Jena, S., Tulsian, K.D., Rana, A., Choudhury, S.S., Biswal, H.S., 2020, Non-conventional hydrogen bonding and aromaticity: a systematic study on model nucleobases and their solvated clusters, *ChemPhysChem* 21, 1826–1835.
- [20] Dias, J., Ramos, G., Marinho, P., Gester, R., Andrade-Filho, T., 2021, Theoretical investigation of adsorption of kojic acid on carbon nanotubes, *Mater. Lett.* 294.