DBD-UV 降解水中三氯乙酸反应机理研究

一.成果完成人及所在单位：甘嘉铭，环境科学与工程学院　　指导教师：王蕾

二.成果简介：

利用 DBD-UV 降解水中 TCAA，搭建 DBD-UV 降解 TCAA 反应装置，研究了其放电特性以及电场仿真，优化电极和放电条件，提高放电效率与稳定性；分析了降解过程中的中间产物，研究了反应过程中产生的各类活性物质；采用量子化学计算探究反应过程中的键能、中间产物及断键的方式；采用实验与量子化学计算相结合的方式，探究 DBD-UV 降解 TCAA 反应机理。为开发消毒副产物新型处理方法及装置提供参考数据和技术支持。

三. 主要研究内容及创新点：

本项目设计并搭建了一套介质阻挡放电引发 UV 的实验装置如图 1。稀有气体的介质阻挡放电激发辐射是产生紫外和真空紫外辐射的有效方法。为探究 TCAA 脱氯的过程，通过 DFT 计算得到 TCAA 的 C-Cl 的键能为 59.44kcal/mol，由于计算的是离子所以键能略小于 TCAA 的键能(66.3kcal/mol)是合理的。键能远小于 DBD/UV 的能量，图 2 为 TCAA 的轨道跃迁，可以看出 S_0->S_1, S_0->S_2 均为 n 到排斥态 σ*，因此在 S_1，S_2 处均会出现光解离的现象即 C-Cl 键会断开。图 3 是 TCAA 脱羧的势能面扫描，结果表明 TCAA 的降解有一部分是热脱羧导致的并且沿着势能面最低的位置发生断键。



图 1 DBD/UV 装置图

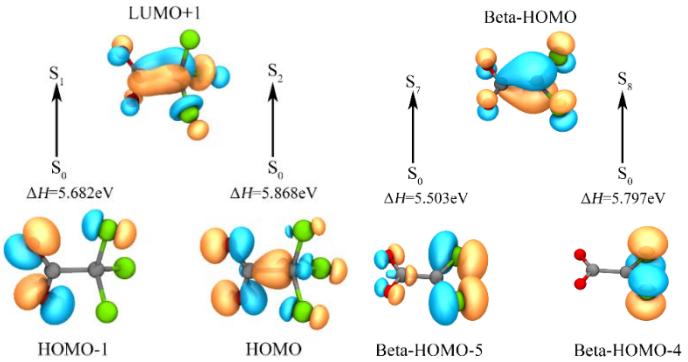


图 2 TCAA 的轨道跃迁

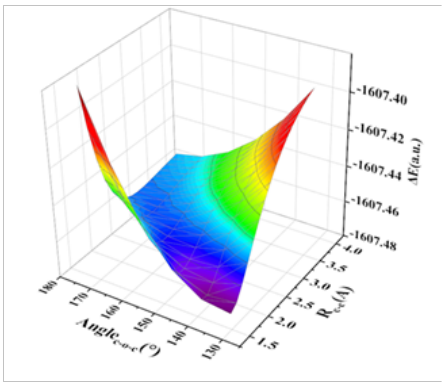


图 3 TCAA 脱羧的势能面

四. 主要研究成果及应用情况

- 授权专利 2 项

联系人：甘嘉铭，　　电　话：15870883610　　Email: Ganjiam@stu.xmut.edu.cn