

Journal Pre-proofs

Simulating the green synthesis process of selenium nanoparticles using willow leaf extract under subcritical water conditions and evaluating their antifungal and antioxidant properties

Hamed Dindar, Nima Isafi, Sarvin Mohammadi-Aghdam, Omid Ahmadi

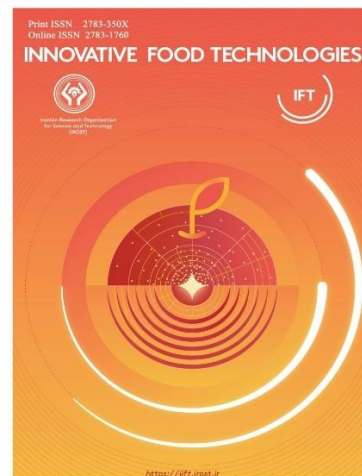
DOI: <https://doi.org/10.22104/ift.2025.7840.2235>

To appear in: Innovative Food Technologies (IFT)

Received Date: 10 September 2025

Revised Date: 10 November 2025

Accepted Date: 16 November 2025



Please cite this article as: Hamed Dindar, Nima Isafi, Sarvin Mohammadi-Aghdam, Omid Ahmadi, Simulating the green synthesis process of selenium nanoparticles using willow leaf extract under subcritical water conditions and evaluating their antifungal and antioxidant properties, *Innovative Food Technologies* (2025),

doi: <https://doi.org/10.22104/ift.2025.7840.2235>

This is a PDF file of an article that has undergone enhancements after acceptance, such as the addition of a cover page and metadata, and formatting for readability, but it is not yet the definitive version of record. This version will undergo additional copyediting, typesetting and review before it is published in its final form, but we are providing this version to give early visibility of the article. Please note that, during the production process, errors may be discovered which could affect the content, and all legal disclaimers that apply to the journal pertain.

© 2023 The Author(s). Published by iroast.org.

شبیه‌سازی فرآیند سنتز سبز نانوذرات سلنیوم با استفاده از عصاره برگ درخت بید تحت شرایط آب مادون بحرانی و بررسی خواص آن

حامد دیندار^۱، نیما ایصافی^۱، سروین محمدی اقدم^۲، امید احمدی^{۳*}

۱. کارشناسی، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه کردستان، سنندج، ایران

۲. دانشیار، گروه شیمی، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

۳. استادیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه کردستان، سنندج، ایران

o.ahmadi@uok.ac.ir

چکیده:

شبیه‌سازی فرآیند سنتز نانوذرات سلنیوم به عنوان روشی مؤثر در کاهش هزینه و زمان مطالعه، مورد بررسی قرار گرفت. فرآیند سنتز نانوذرات سلنیوم با استفاده از نرم‌افزار COMSOL Multiphysics بر پایه شرایط آب مادون بحرانی (دمای بالاتر از ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد) شبیه‌سازی شد و پارامترهای بهینه شامل دما و زمان جهت دستیابی به ویژگی‌های مطلوب نانوذرات تعیین گردید. سنتز سبز نانوذرات سلنیوم با استفاده از عصاره برگ درخت بید با غلظت ۰/۱ جرمی/حجمی به مقدار ۱۰ میلی لیتر با ۲۰ میلی لیتر نمک سدیم سلنیت ۱۰ میلی مولار تحت شرایط آب مادون بحرانی انجام گرفت. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که در دمای ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد و مدت زمان ۸۰ دقیقه، حداقل مدت زمان انتظار جهت اغناشدن شرایط آب مادون بحرانی می باشد. این نتایج نشان می‌دهد که شبیه‌سازی فرآیندهای سنتز نانوذرات، می‌تواند نقش بسزایی در پیش‌بینی نتایج، کاهش هزینه‌ها و تسریع روند توسعه نانوذرات سلنیوم در حوزه‌های مختلف ایفا کند. نانوذرات تولید شده پس از تحلیل‌های فیزیکی و شیمیایی، میانگین اندازه حدود ۹۵ نانومتر و شاخص پراکندگی ۰/۲۹۵ را نشان دادند، در حالی که پتانسیل زتا حدود ۱۹/۸- میلی‌ولت بر پایداری ترمودینامیکی بالا دلالت داشت. همچنین محصول تولید شده با خاصیت آنتی اکسیدانی ۴۲٪ توانایی بالایی در مهار رادیکال‌های آزاد از خود نشان داده و محصول تولید شده با خاصیت ضدقارچی ۷۶٪ نشان داد محصول مناسبی جهت استفاده مصارف از بین بردن قارچ‌ها می باشد.

واژگان کلیدی: نانوذرات سلنیوم، عصاره برگ درخت بید، شبیه‌سازی، آب مادون بحرانی، ضدقارچی، آنتی اکسیدانی

در سال‌های اخیر، توسعه فناوری‌های سبز و روش‌های پایدار در حوزه نانوفناوری به‌طور گسترده توسط محققان و صنایع مختلف مورد توجه قرار گرفته است. این رویکردهای فناورانه، مبتنی بر بهره‌گیری از مواد طبیعی و کاهش مصرف منابع و انرژی، به منظور کاهش اثرات منفی بر محیط‌زیست و ارتقاء سلامت انسان‌ها طراحی شده‌اند [۱]. در این راستا، سنتز نانوذرات با روش‌های سبز، نه تنها به عنوان جایگزینی مناسب برای روش‌های سنتزی شیمیایی و فیزیکی مطرح است، بلکه می‌تواند منجر به تولید نانوذرات با ویژگی‌های فیزیولوژیکی و شیمیایی مطلوب و با مصرف کم‌ترین میزان مواد شیمیایی و انرژی گردد [۲-۴]. یکی از موضوعات مورد علاقه در حوزه نانوفناوری، نانوذرات سلنیوم است؛ زیرا این نانوذرات، به دلیل خواص بیولوژیکی، آنتی‌اکسیدانی، ضد سرطانی و اثرات مثبت بر سیستم ایمنی، کاربردهای فراوانی در پزشکی، داروسازی، ساخت مواد زیستی و محیط‌زیست یافته‌اند. بنابراین، توسعه روش‌های کارآمد و سبز برای سنتز این نانوذرات، می‌تواند نقش مهمی در کاربردهای آینده ایفا کند [۵، ۶].

در فرآیندهای سنتزی متداول و سنتی نانوذرات، اغلب از مواد شیمیایی خطرناک، حلال‌های نایمن، و شرایط کنترل‌شده و گاهی پرمصرف استفاده می‌شود که این موارد ممکن است منجر به آلودگی‌های زیست‌محیطی و مشکلات ایمنی شوند. به همین دلیل، تحقیقات در حوزه سنتز سبز نانوذرات، تمرکز بر استفاده از منابع طبیعی، مواد گیاهی و فناوری‌هایی است که کمترین اثر منفی بر محیط زیست دارند. در این راستا، عصاره‌های گیاهی، به ویژه برگ‌ها، ریشه‌ها و میوه‌ها، به عنوان مواد کاهش‌دهنده و تثبیت‌کننده در فرآیندهای نانومقیاس، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۷]. عصاره‌های گیاهی حاوی ترکیبات فعال شیمیایی مانند فنول‌ها، فلاونوئیدها، تری‌ن‌ها و اسیدهای آلی هستند که قابلیت کاهش آیون‌های فلزی و تشکیل نانوذرات را دارند. این روش‌ها نه تنها محیط‌زیستی هستند، بلکه به دلیل طبیعی بودن مواد، سازگاری زیستی و قابلیت کنترل بر فرآیند تهیه نانوذرات، از مزیت‌های قابل توجهی برخوردارند [۸].

یکی از فناوری‌های نوین در سنتز نانوذرات، استفاده از آب‌مادون‌بحرانی است که به عنوان عملی مؤثر در کنترل دما، فشار و فرموله‌سازی مواد در محیط‌های آبی و در حالی که سازگاری کامل با محیط‌زیست دارد، شناخته شده است. آب‌مادون‌بحرانی، در مقایسه با محیط‌های دیگر، توانایی پایداری بیشتر، کاهش مصرف مواد شیمیایی خطرناک، و تولید نانوذرات با اندازه و شکل یکنواخت‌تر را فراهم می‌کند. این فناوری، با فراهم کردن محیطی متعادل و کنترل‌شده، امکان تولید نانوذرات با خصوصیات مطلوب و قابلیت برنامه‌ریزی شده را فراهم می‌سازد [۹، ۱۰]. محققان متعددی در زمینه استفاده از آب‌مادون‌بحرانی جهت کمک به سنتز سنتز نانوذرات فعالیت داشته‌اند که می‌توان به سنتز نانوذرات اکسید آهن اشاره نمود [۱۱-۱۳].

برگ درخت بید، حاوی ترکیبات فعال زیستی، مانند فنول‌ها و فلاونوئیدها، هستند که توانایی کاهش و تثبیت آیون‌های سلنیوم در فرآیند سنتز را دارند و می‌توانند منجر به تشکیل نانوذرات با اندازه و شکل کنترل شده شوند. همچنین، استفاده از فناوری آب‌مادون‌بحرانی، در این فرآیند، به عنوان یک رویکرد نوین، فرآیند تولید را در قالبی قابل کنترل، پایدار و سازگار با محیط‌زیست تغییر می‌دهد. در فرآیند سنتز سبز نانوذرات سلنیوم با استفاده از عصاره برگ درخت بید، تحت شرایط آب‌مادون‌بحرانی هدف این است که با بهره‌گیری از عصاره طبیعی برگ‌های بید، ضمن کاهش وابستگی به مواد شیمیایی، فرآیند تولید نانوذرات به شکلی پایدار، اقتصادی و سازگار با محیط‌زیست انجام شود [۱۴].

در یکی از حوزه‌های نوظهور در زمینه نانوذرات، سنتز نانوذرات سلنیوم با روش‌های سبز، به طور خاص، جذابیت زیادی یافته است. سلنیوم، عنصری است که در انسان و حیوانات نقش مهمی در فعالیت‌های بیولوژیکی دارد و خواص بیولوژیکی آن، از جمله اثرات آنتی‌اکسیدانی، ضد التهاب، ضد سرطانی و تقویت سیستم ایمنی، بر اثربخشی بیولوژیک نانوذرات آن افزوده است. نانوذرات سلنیوم، نسبت به اشکال ماکروسکوپی و یا یون‌های آزاد، خواص فیزیولوژیکی بهتری دارند و به عنوان داروهای هدفمند و مکمل‌های غذایی، در تقویت سیستم ایمنی و پیشگیری از بیماری‌های مزمن، کاربرد دارند. تولید نانوذرات سلنیوم به صورت سبز و با بهره‌گیری از مواد طبیعی، به عنوان راهکاری کارآمد در کاهش هزینه‌ها و افزایش ایمنی در فرآیند تولید است [۱۵، ۱۶].

شبیه‌سازی و مدل‌سازی از جمله فناوری‌های پیشرفته و کاربردی هستند که نه تنها در حوزه‌های علمی، بلکه در امور روزمره و زندگی عادی به طور گسترده مورد بهره‌برداری قرار می‌گیرند. مدل‌سازی، فرآیند ساختن یک مدل و شبیه‌سازی، نمایش ساده و کلی از یک سیستم پیچیده است که امکان مطالعه و تحلیل آن را در قالبی کم‌هزینه قابل فهم فراهم می‌کند. در اصل، این دو روش به ما اجازه می‌دهند که رفتارها و واکنش‌های یک سیستم را به روشی ساده و قابل کنترل مشاهده و درک کنیم. در طبیعت، کنترل و مدیریت دقیق این حرکات و پدیده‌ها اغلب عملی نیست و ممکن است هزینه‌ها و زمان‌های زیادی صرف شود. علاوه بر این، در حوزه مهندسی و طراحی، همواره با مواردی مواجه هستیم که طراح قصد دارد به جای ساخت سیستم جدید، جایگزینی مؤثر برای سیستم اصلی ارائه دهد. انجام چنین آزمایش‌هایی به صورت عملی و در قالب نمونه واقعی، تقریباً غیرقابل اجرا است و ممکن است هزینه‌های هنگفتی در پی داشته باشد. در چنین شرایطی، استفاده از روش‌های مدل‌سازی و شبیه‌سازی به عنوان ابزارهای کارآمد و به صرفه، این امکان را فراهم می‌آورند که با کم‌ترین هزینه، طرح‌ها و گزینه‌های مختلف آزمایش و ارزیابی شوند. این تکنیک‌ها نه تنها در کاهش هزینه و زمان مؤثرند، بلکه به بهبود تصمیم‌گیری و انتخاب بهترین گزینه نهایی کمک شایانی می‌کنند [۱۷، ۱۸].

در تحقیق حاضر، تاثیر پارامترهای مختلف، نظیر غلظت عصاره، دما، فشار و زمان، بر اندازه، توزیع اندازه و خواص نانوذرات سلیوم تولید شده مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. همچنین جهت اطمینان از فراهم نمودن شرایط آب‌مادون بحرانی ارائه مدلی مناسب و شبیه‌سازی کلی فرآیند با استفاده از نرم افزار COMSOL Multiphysics 5.6 انجام شد. جهت حصول اطمینان از درستی سنتز نانوذرات سلیوم، خواص کلی از جمله میانگین اندازه ذرات، پراکندگی اندازه ذرات و میزان بار سطحی (تابعی از پایداری) نانوذره سنتز شده بررسی شد. هدف نهایی از این تحقیق، بهبود فرآیند سنتز و رسیدن به نانوذراتی است که بتوانند در حوزه‌های مختلف، به‌ویژه داروسازی، زیست‌فناوری و محیط‌زیست، مورد استفاده قرار گیرند. همچنین، خواص نانوذرات، مانند پایداری، بی‌اثر بودن و قابلیت حمل و نقل، مورد بررسی قرار می‌گیرند تا کارایی و بهره‌وری آن‌ها در کاربردهای عملی مشخص شود.

در نتیجه، این پژوهش نه تنها زمینه‌های جدیدی در فرآیندهای سنتزی سبز نانوذرات سلیوم ایجاد می‌کند، بلکه با ارائه رویکردی نوین و سازگار با محیط‌زیست، به توسعه فناوری‌های پایدار و کارآمد در حوزه نانوفناوری کمک خواهد کرد. در کنار این، نتایج حاصله می‌تواند راهنمایی برای پژوهش‌های آتی در زمینه استفاده‌های گسترده‌تر از مواد طبیعی و فناوری‌های آب‌مادون بحرانی در تولید نانوذرات با خواص مطلوب، باشد. با توجه به نیاز روزافزون به فناوری‌های سبز و اهمیت روزافزون نانوذرات در علوم پزشکی، زیست‌فناوری، و صنعت، این مطالعه می‌تواند گامی مهم در جهت توسعه رویکردهای نوین و دوستدار محیط در تولید نانوذرات باشد که با بهره‌برداری مؤثر از مواد طبیعی و فناوری‌های پیشرفته، سلامت انسان و حفظ محیط‌زیست را هم‌زمان بهبود بخشد.

۲- مواد و روش‌ها (بخش تجربی و آزمایشگاهی)

۲-۱- مواد

نمک سدیم سلیت از سیگما خریداری شد. برگ درخت بید از درخت‌های شهرستان سنندج جدا گردید. قارچ پنی سیلینیوم دیگیتاتوم با شماره (PTCC 5251) از بانک میکروبی ایران تهیه گردید. ماده محیط کشت PDA از oxoid خریداری گردید. ماده مخصوص خاصیت آنتی اکسیدانی (DPPH) از سیگما خریداری گردید. آب مقطر از شرکت مروارید پارس تهیه گردید.

۲-۲- روش‌ها

۲-۲-۱- عصاره‌گیری از برگ درخت بید

پس از شست و شو و خشک نمودن ۵ روزه برگ درخت بید، مقدار ۱۰ گرم از برگ پودر شده به ۱۰۰ میلی لیتر آب در حال جوش اضافه گردیده و ۱۰ دقیقه فرصت داده شد تا عصاره‌گیری کامل انجام شود، سپس با صاف کردن آن با کاغذ واتمن شماره ۵، عصاره بدست آمده و در دمای یخچال (۴ درجه سانتیگراد) نگه داری شد.

۲-۲-۲- سنتز سبز نانوذرات سلیوم

با توجه به منابع پیشین غلظت محلول نمک سدیم سلیت مورد نیاز جهت سنتز سبز نانوذرات ۱۰ میلی مولار بوده که مقدار ۲۶۳/۰ گرم از نمک سدیم سلیت به مقدار ۱۰۰ میلی لیتر آب دوبار تقطیر اضافه گردید [۱۹]. از عصاره استخراج شده برگ درخت بید به عنوان عامل احیاکننده استفاده گردید. مقدار ۱۰ میلی لیتر از عصاره برگ درخت بید به ۲۰ میلی لیتر از محلول نمک سدیم سلیت ۱۰ میلی مولار اضافه گردیده و محلول بدست آمده به اتوکلاو هیدروترمال تحت شرایط آب مادون بحرانی معادل با دمایی ۲۰۰ درجه سانتی گراد و فشار ۱/۷۵ بار، در مدت زمان های مختلف ۰ الی ۲۴۰ دقیقه با گام ۱۰ دقیقه قرار گرفت.

۲-۲-۳- آنالیزها

آنالیز پراکندگی نور دینامیکی^۱ (DLS) که روشی فیزیکی، غیرمخرب است، جهت تعیین میانگین اندازه ذرات، شاخص پراکندگی ذرات (PDI)^۲ و همچنین مقدار پتانسیل زتا (معیاری از پایداری الکترواستاتیکی) نانوذرات با استفاده از دستگاه particle size analyzer (Malvern instruments, Zetasizer Nano ZS, Worcestershire, UK) انجام شد. همچنین به منظور بررسی خواص نانوذرات سلیوم سنتز شده، خواص آنتی اکسیدانی با روش DPPH و همچنین خاصیت ضد قارچی با روش شرح داده شده در پژوهش احمدی و همکاران انجام گرفت [۲۰].

۲-۳- شبیه سازی

در تحقیق حاضر از نرم افزار COMSOL multiphysics که یک مجموعه کامل شبیه سازی بوده و می تواند معادلات دیفرانسیل سیستم های غیرخطی را توسط مشتق های جزئی به روش المان محدود در فضاهای یک، دو و سه بعدی حل نماید که شامل ۵ مرحله می باشد:

۱- فرضیات و تئوری مسئله

۲- تعریف هندسه ناحیه مورد نظر و بیان فیزیک مسئله

۳- بیان معادلات حاکم و روش حل آن

۴- تعیین گره بندی، شرایط مرزی و اولیه

۵- حل مسئله، شبیه سازی فرآیند و تفسیر نتایج

۲-۳-۱- تئوری مسئله

در تحقیق حاضر گرادیان دمایی انتقال حرارت، در روش آب مادون بحرانی اثرگذار بر روی شرایط سنتز نانوذرات سلیوم مورد بررسی قرار گرفت، به طوری که برای حل مسئله از معادلات انتقال حرارت به صورت ناپایا با تلفیق انتقال حرارت هدایت و همرفت استفاده شد.

۲-۳-۲- فیزیک و هندسه مسئله (مدل فیزیکی)

شکل هندسی مسئله یک اتوکلاو هیدروترمال (شکل ۱ الف) بوده که شامل دو محفظه استوانه ای شکل هم مرکز می باشد که فرمولاسیون سنتز نانوذرات سلیوم متشکل از (محلول ۱۰ میلی مولار سدیم سلیت و عصاره برگ درخت بید) در محفظه ای داخلی با جنس تفلون و در نهایت در محفظه استیل ضد زنگ قرار خواهند گرفت. شماتیک کلی اتوکلاو هیدروترمال در (شکل ۱ ب) نشان داده شده است.

¹ Dynamic Light Scattering

² Polydispersity Index

۲-۳-۳- معادلات حاکم (مدل ریاضی) و روش حل

جهت حل، مدلسازی و بدست آوردن گرادیان دمایی انتقال حرارت در سیستم استوانه ای تحقیق حاضر از تلفیق انتقال حرارت هدایت و همرفت استفاده شد، هدف کلی بدست آوردن گرادیان دمایی و بدست آوردن مقدار دما در بخش تولید نانومولسیون اساس آویشن بوده به طوری که اثباتی بر فراهم نمودن شرایط عملیاتی مادون بحرانی باشد، معادلات حاکم بر انتقال حرارت در این بخش بیان شده است.

در معادله (۱) حالت کلی انتقال حرارت ناپایا (متغیر با زمان) که شامل ترم های، انتقال حرارت همرفت، هدایت و تولید حرارت می باشد، نشان داد شده است.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p u \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (۱)$$

که در معادله (۱)، ρ چگالی بر حسب (کیلوگرم بر مترمکعب)، c_p ظرفیت گرمایی ویژه بر حسب (ژول بر کیلوگرم کلوین)، k ضریب هدایت گرمایی بر حسب (وات بر متر کلوین) و Q مقدار گرمای تولید شده است. اگر گرادیان دمایی بخش هدایت به صورت گسترده بیان شود، معادله کلی انتقال حرارت به معادله زیر (۲) تبدیل خواهد شد.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p u \cdot \nabla T = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(kr \frac{\partial T}{\partial \phi} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q \quad (۲)$$

با فرضیات زیر معادله انتقال حرارت ناپایا ساده سازی خواهد شد.

- ۱- تولید حرارت در سیستم مورد مطالعه موجود نبوده و میتوان از آن صرف نظر نمود.
 - ۲- انتقال حرارت رسانشی در جهت ارتفاع (z) بیشترین مقدار را داشته و میتوان از بعد های دیگر که شامل شعاع (r) و بعد زاویه ای (ϕ) بوده و کمترین تغییر دما در آنها اتفاق خواهد افتاد، صرف نظر کرد.
 - ۳- ضریب انتقال حرارت هدایت مستقل از بعدهای مختصاتی بوده و مقدار ثابتی دارد [۲۱].
- با فرضیات گفته شده معادله انتقال حرارت ناپایا صورت زیر، معادله (۳) ساده خواهد شد.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p u \cdot \nabla T = \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (۳)$$

دمای اعمال شده از طرف آون (کوره) ۲۰۰ درجه سانتیگراد بوده و به صورت انتقال حرارت همرفت، گرما از محیط داخلی کوره به سطح اتوکلاو هیدروترمال انتقال پیدا خواهد کرد و سپس با روش انتقال حرارت هدایت، از سطح اتوکلاو (محفظه ای استیل) ابتدا به بخش محفظه ی تفلون و در نهایت به محلول فرموله شده (محلول سدیم سلنیت و عصاره برگ درخت بید) انتقال پیدا می کند. طبق قوانین انتقال حرارت و مفاهیم مقاومت های موجود در انتقال حرارت مبنی بر افت دما در مسیر انتقال گرما، در سیستم و فرآیند تحقیق حاضر انتقال گرما از کوره به سطح اتوکلاو و از سطح اتوکلاو به مخلوط مواد جهت سنتز نانوذرات سلنیوم، با توجه به متنوع بودن جنس های مواد بکار برده شده (استیل و تفلون) و دارا بودن ضرایب رسانس (k) مختلف، مقاومت های متنوعی وجود داشته و حرارت دریافت شده توسط نانوذرات سلنیوم بنظر میرسد کمتر از ۲۰۰ درجه سانتیگراد داشته که یکی از عوامل مهم زمان اعمال حرارت می باشد که با شبیه سازی و مدلسازی فرآیند به این قضیه میتوان پی برد.

۲-۳-۴- گره بندی، روش حل، شرایط مرزی و اولیه

معادلات حاکم بر مدل با شرایط مرزی و اولیه مناسب با استفاده از نرم افزار شبیه ساز COMSOL، به صورت عددی حل شده که در آن از روش المان محدود^۱ (FEM) برای حل عددی معادلات حاکم استفاده شده است. بهمین خاطر کل سیستم به بخش های کوچک (که هر کدام یک گره، یک المان که یک معادله بحساب می آیند) تقسیم بندی شده که به صورت مثلثی برای گره بندی استفاده شد.

جهت حل معادله انتقال حرارت ناپایا به صورت عددی مقادیر ثابت های مختلف محفظه های استیل و تفلون از جمله (چگالی (ρ) ظرفیت گرمای ویژه (C_p) و ضریب انتقال گرمای هدایت (k) و ثابت نسبت پواسون) در جدول ۱ گزارش شده است.

ضریب انتقال حرارت همرفتی هم مقدار $\frac{w}{m^2.K}$ در نظر گرفته شد.

معادله انتقال حرارت نهایی بدست آمده به صورت معادله دیفرانسیلی جزئی (دارای ۲ متغیر مستقل زمان و مکان) بوده و به همین خاطر نیازمند شرط مرزی و شرط اولیه می باشد. بهمین خاطر شرط مرزی و اولیه برای حل مسئله و مدلسازی تحقیق حاضر ۲۰۰ درجه سانتیگراد (دمای کوره که اتوکلاو در معرض آن است) و دمای اولیه کل سطوح اتوکلاو شامل (محفظه استیل، محفظه تفلون و نانوذرات سلنیوم) ۲۰ درجه سانتیگراد در نظر گرفته شد.

۲-۳-۵- حل مسئله و تفسیر نتایج

پس از اجرای نرم افزار و حل آن، منحنی های تغییرات دما بدست آمده که به منظور صرفه جویی در مصرف انرژی، فرمولاسیون (محلول نمک سدیم سلنیت و عصاره برگ درخت بید) در زمان های مختلف ۱۰ الی ۲۴۰ دقیقه با گام ۱۰ دقیقه با قرار دادن در کوره شبیه سازی شد و نتایج مختلف مطابق با شرایط اعمال شده بدست آمد (شکل ۲).

چنانچه در شکل ۲ مشاهده می شود، بخش مشخص شده (با مستطیل نقطه چین) مربوط به محفظه حاوی نانوذرات سلنیوم بوده، که در در زمان های کمتر از ۸۰ دقیقه دارای دمای پایین تر از ۱۰۰ درجه سانتیگراد بوده که این شرایط مغایر با شرایط آب مادون بحرانی بوده و احتمال سنتز نانوذرات بسیار پایین می باشد، به همین خاطر با شبیه سازی حاضر کمترین زمان ماندگاری اتوکلاو هیدروترمال در آن ۸۰ دقیقه برای شرایط عملیاتی انتخاب شد. اتوکلاو هیدروترمال دو محفظه ای که شامل محفظه استیل و تفلون می باشد، دماهای مختلفی را در بخش های متنوع آن تجربه می نماید، اما مهمترین بخش محلول موجود در محفظه داخلی بوده که در زمان های کمتر از ۸۰ دقیقه، شرایط آب مادون بحرانی (دمای بالای ۱۰۰ درجه سانتیگراد) برآورده نشده و احتمال سنتز نانوذرات سلنیوم کاهش پیدا خواهد کرد، به همین خاطر با شبیه سازی انجام گرفته کمترین زمان انتظار جهت نیل به هدف اغنا شدن شرایط آب مادون بحرانی ۸۰ دقیقه در نظر گرفته شد که میتوان در این زمان کمترین میزان مصرف انرژی و همچنین صرفه جویی در زمان فرآیند سنتز را انتظار داشت. شماتیک گرافیکی تغییرات دما نیز برای کل اتوکلاو هیدروترمال در بیشترین زمان (۲۴۰ دقیقه) در شکل ۳ گزارش شده است.

۲-۳-۶- بررسی استقلال حل از تعداد شبکه و حجم کنترل ها

دقت حل در نرم افزار حل کننده معادلات حاکم به طور زیادی متأثر از تعداد و اندازه حجم کنترل های ایجاد شده در دامنه حل است. هر چقدر تعداد حجم کنترل ها (گره ها) بیشتر باشد، پاسخ دقیق تر خواهد بود. اما این افزایش حجم کنترل ها افزایش زمان حل را نیز به دنبال خواهد داشت. در مطالعه حاضر از نرم افزار کامسول جهت ساخت و شبکه بندی اتوکلاو استفاده شده است. جهت شبکه بندی از شبکه و گره مثلثی استفاده شده و برای بررسی استقلال حل از تعداد گره ها، دو شبکه بندی دیگر با

¹ Finite element method

اندازه های متفاوت و کوچک تر مطابق شکل ۴ (الف-ج) تهیه شد و تفاوت قابل ملاحظه ای بین نتایج دیده نشد، به همین خاطر بزرگترین شبکه بندی، جهت صرفه جویی در وقت شبیه سازی انتخاب شد.

۴-بحث و نتایج (تجربی و آزمایشگاهی)

به منظور بررسی دقیق تر و اطمینان حاصل کردن از تولید ماده مورد نظر، آنالیزهای متنوعی بر روی نانوذرات سلیوم انجام شد که در بخش های زیر بیان شده است.

۴-۱-توزیع و میانگین اندازه نانوذرات سلیوم سنتز شده

میانگین اندازه نانوذرات سنتز شده یکی از مهمترین خواص نانوذرات سلیوم بوده که در بسیاری از خواص نانوذرات از جمله خواص ضدقارچی و آنتی اکسیدانی نقش مهمی دارد. از دیگر خواص مهم نانوذرات، شاخص پراکندگی اندازه ذرات بوده که عدد بدون بعدی بین صفر الی یک بوده که هر چقدر این عدد به صفر نزدیکتر باشد، نانوذرات دارای ذرات یکسان می باشد که باعث پایداری بیشتر نانوذرات سلیوم خواهد شد که این دو خواص با استفاده از آنالیز DLS انجام شد [۲۲].

نتایج حاصل از آنالیز DLS نشان داد که متوسط اندازه ذرات و پراکندگی اندازه نانوذرات سلیوم سنتز شده به ترتیب ۹۵ نانومتر و ۰/۲۹۵ می باشد (شکل ۵) همانطور که از نتایج شکل ۵ که نمایشگر توزیع اندازه ذرات بوده مشخص است اندازه نانوذرات سنتز شده دارای اندازه بسیار کم و همچنین با توجه به مقدار پایین شاخص PDI نشان دهنده یکسان بودن و هم اندازه بودن ذرات می باشد، که با توجه به این، خواص بسیار مطلوبی از خود نشان داده و می تواند کاربردهای مناسبی داشته باشد.

۴-۲-پتانسیل زتا نانوذرات سلیوم سنتز شده

پتانسیل زتا که نشان دهنده بار سطحی نانوذرات سلیوم بوده، معیاری از پایداری کلی نانوذرات بوده و هر چقدر این میزان بار الکتریکی سطحی بالا باشد، نانوذره تولید شده پایدارتر بوده و زمان ماندگاری آن بالا خواهد رفت [۲۳]. پتانسیل زتای نانوذرات سلیوم سنتز شده دارای مقدار متوسط ۱۹/۸- میلی ولت بوده (شکل ۶)، که نشان از بار سطحی بالای آن می باشد. بنظر می رسد با شبیه سازی شرایط عملیاتی (۲۰۰ درجه سانتیگراد و ۸۰ دقیقه) نانوذرات سلیوم با میانگین اندازه ذرات پایین، پراکندگی مناسب و پتانسیل زتای بالا (پایداری بالا) تولید شده است. همگونی پراکندگی ذرات و پتانسیل زتای بالا پایداری بالایی دارند. تجمع ذرات، هنگامی که که پتانسیل زتا یا بارالکتریکی بالا است، کمتر رخ می دهد. بنابراین تجمع و بزرگتر شدن اندازه ذرات سنتز شده توسط این روش بسیار کم است.

۴-۳-خاصیت آنتی اکسیدانی و ضد قارچی نانوذرات سلیوم سنتز شده

نانوذرات سلیوم سنتز شده با روش آب مادون بحرانی نشان دادند که دارای فعالیت های بیولوژیکی قابل توجهی هستند، به طوری که خاصیت آنتی اکسیدانی آن ها برابر با ۴۲٪ و اثر ضدقارچی آن ها در کاهش رشد قارچ انتخاب شده (پنی سلینیوم دیگیتاتوم) به میزان ۷۶٪ گزارش شد. این نتایج نشان دهنده تأثیر قابل توجه نانوذرات در مهار فرآیندهای اکسیداتیو است، که می تواند ناشی از افزایش سطح تماس و سطح فعال ذرات با سلول های قارچی و فاکتورهای آنتی اکسیدان طبیعی باشد. روش آب مادون بحرانی، به دلیل ایجاد ذرات نانو با توزیع یکنواخت و ساختار کریستالی پایدار، امکان انتقال بهتر و موثرتر ترکیبات فعال را فراهم کرده که این ویژگی ها سبب افزایش فعالیت بیولوژیکی ذرات می شود. این یافته ها نمایانگر پتانسیل بالای نانوذرات سلیوم در توسعه راهکارهای نوین در حوزه داروهای ضد اکسیدان و ضدقارچ در زمینه های پزشکی و کشاورزی هستند، که با توجه به روش سبز و سازگار با محیط زیست تولید شده اند، اهمیت بیشتر یافته های حاضر را در مسیر توسعه فناوری های نوین و پایدار نشان می دهد.

۵-نتیجه گیری

در این پژوهش، تولید نانوذرات سلیوم با استفاده از شبیه سازی شرایط عملیاتی شامل دما و زمان به منظور کاهش زمان و هزینه انجام شد. نتایج شبیه سازی، پارامترهای بهینه دما و زمان را برای سنتز نانوذرات مشخص و ماده نهایی را تولید کرد. تحلیل های

ساختاری و همبستگی نشان دادند که خواص فیزیکوشیمیایی نانوذرات مناسب و مؤثر برای کاربردهای بیولوژیکی و دارویی است. همچنین همسنجی منطقی بین داده‌های شبیه‌سازی و آزمایشگاهی وجود دارد که قابلیت پیش‌بینی نتایج آزمایشگاهی و کاهش آزمایش‌های غیرضروری را تأیید می‌کند. در نتیجه، شبیه‌سازی فرایندهای سنتز نانوذرات، به‌عنوان ابزاری کارآمد برای بهینه‌سازی و صرفه‌جویی در هزینه‌ها مطرح است و پیشنهاد می‌شود تا بهبود رویکردهای پایدار و اقتصادی در تولید نانوذرات سلنیوم برای مصارف دارویی و زیستی را ترویج کند. برای تحقیقات آتی سایر پژوهشگران، به‌کارگیری طراحی آزمایش‌های چندمتغیره و مدل‌سازی یادگیری ماشین برای بهینه‌سازی مداوم پارامترها پیشنهاد می‌شود تا دقت پیش‌بینی نتایج و صرفه‌جویی در زمان و هزینه بهبود یابد.

هیچ‌گونه تعارض منافع توسط نویسندگان بیان نشده است.

مراجع:

1. Hashemilar, H., Jafarizadeh-Malmiri, H., Ahmadi, O., and Jodeiri, N. (2023). Enzymatically preparation of starch nanoparticles using freeze drying technique–gelatinization, optimization and characterization. *International Journal of Biological Macromolecules*. 237: 124137. 10.1016/j.ijbiomac.2023.124137
2. Eshghi, M., Kamali-Shojaei, A., Vaghari, H., Najian, Y., Mohebian, Z., Ahmadi, O., and Jafarizadeh-Malmiri, H. (2021). Corylus avellana leaf extract-mediated green synthesis of antifungal silver nanoparticles using microwave irradiation and assessment of their properties. *Green Processing and Synthesis*. 10(1): 606-613. 10.1515/gps-2021-0062
3. Hamoud Alshahrani, S., Alameri, A.A., Zabibah, R.S., Turki Jalil, A., Ahmadi, O., and Behbudi, G. (2022). Screening method synthesis of AgNPs using Petroselinum crispum (parsley) leaf: Spectral analysis of the particles and antibacterial study. *Journal of the Mexican Chemical Society*. 66(4): 480-487. 10.29356/jmcs.v66i4.1803
4. Khalilnejad, A., Lashkari, R., Irvani, M., and Ahmadi, O. *Application of synthesized silver nanofluid for reduction of oil-water interfacial tension*. in Saint Petersburg 2020. 2020. European Association of Geoscientists & Engineers. 10.3997/2214-4609.202053046
5. Shayan, S., Hajihajikolai, D., Ghazale, F., Gharahdaghigharahtappeh, F., Faghih, A., Ahmadi, O., and Behbudi, G. (2024). Optimization of green synthesis formulation of selenium nanoparticles (SeNPs) using peach tree leaf extract and investigating its properties and stability. *Iranian Journal of Biotechnology*. 22(3): e3786. 10.30498/ijb.2024.413943.3786
6. Mirzakhani, L., Jafarizadeh-Malmiri, H., and Ahmadi, O. (2024). Three accelerated methods based on microwave, hydrothermal and conventional heating in the green synthesis of selenium nanoparticles using garlic aqueous extract: Screening and characterization. *Nano-Structures Nano-Objects*. 38: 101162. 10.1016/j.nanoso.2024.101162
7. Ahmadi, O., Sayyar, Z., and Jafarizadeh Malmiri, H. (2023). Optimization of Processing Time, Temperature, and Stirring Rate to Synthesize the Ag Nanoparticles Using Oregano Extract. *Iran. J. Chem. Chem. Eng.* 42(10). 10.30492/ijcce.2023.1971456.5676
8. Mortazavi, P., Azadmard-Damirchi, S., Piravi-Vanak, Z., Ahmadi, O., Anarjan, N., Martinez, F., and Jafarizadeh-Malmiri, H. (2023). Microwave-accelerated pretreatment technique in green extraction of oil and bioactive compounds from camelina seeds: Effectiveness and characterization. *Green Processing Synthesis*. 12(1): 20230101. 10.1515/gps-2023-0101
9. Ahmadi, O. and Jafarizadeh-Malmiri, H. (2020). Effectiveness of soluble oxygen in preparation of thyme oil nanoemulsion-simulation and characterization. *Iranian Chemical Engineering Journal*. 19(110): 42-53. 20.1001.1.17355400.1399.19.110.4.0
10. Ahmadi, O. and Jafarizadeh-Malmiri, H. (2021). Simulation of the Preparation of Thyme Essential Oil Nanoemulsion Process Using Sub-critical Water and Evaluation of Its Properties. *Iranian Journal of Biosystems Engineering*. 51(4): 705-714. 10.22059/ijbse.2019.285553.665203

11. Ruiz-Jorge, F., Portela, J., Sánchez-Oneto, J., and Martínez de la Ossa, E. (2020). Synthesis of micro-and nanoparticles in sub-and supercritical water: from the laboratory to larger scales. *Applied Sciences*. 10(16): 5508. 10.3390/app10165508
12. Mutlu, R.N., Yabalak, E., Acar, A.N., and Gizir, A.M. (2022). Green synthesis of Fe (II, III) oxides nanoparticles in the subcritical water medium and evaluation of their catalytic performance in the oxidation of metoprolol. *Journal of Nanostructure in Chemistry*. 12(1): 79-92. 10.1007/s40097-021-00403-y
13. Chen, X.-Y., Shang, Y.-L., Li, Y.-H., Wang, J.-X., Maimouna, A.G., Li, Y.-X., Zou, D., Foster, N.R., Yun, J., and Pu, Y.J.C.E.J. (2015). Green preparation of uniform prednisolone nanoparticles using subcritical water. 263: 20-26. 10.1016/j.ccej.2014.10.099
14. Esmaili, S., Zinsaz, P., Ahmadi, O., Najian, Y., Vaghari, H., and Jafarizadeh-Malmiri, H. (2022). Screening of four accelerated synthesized techniques in green fabrication of ZnO nanoparticles using Willow leaf extract. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*. 236(11-12): 1567-1581. 10.1515/zpch-2022-0036
15. Namdevrao, A.P., Shaikh, M.S., Rajjak, P.R., Balasaheb, L.M., Balasaheb, S.R., Ali, S.P., Hani, U., Alhabardi, S.A., and Siddique, M.U.M. (2025). Formulation and Optimization of Selenium Nanoparticles Using Passiflora edulis Leaf Extract: Permeation and in Vitro Release Kinetic Study. *Chemistry Biodiversity*: e202500730. 10.1002/cbdv.202500730
16. Rossos, A.K., Banti, C.N., Raptis, P.K., Papachristodoulou, C., Sainis, I., Zoumpoulakis, P., Mavromoustakos, T., and Hadjikakou, S.K.J.M. (2021). Silver nanoparticles using eucalyptus or willow extracts (AgNPs) as contact lens hydrogel components to reduce the risk of microbial infection. 26(16): 5022. 10.3390/molecules26165022
17. Kheirabadi, A.C. and Groulx, D. (2015). Simulating phase change heat transfer using comsol and fluent: Effect of the mushy-zone constant. *Computational Thermal Sciences*. 7(5-6): 427-440. 10.1615/ComputThermalScien.2016014279
18. Turgay, M.B. and Yazıcıoğlu, A.G. (2018). Numerical simulation of fluid flow and heat transfer in a trapezoidal microchannel with COMSOL multiphysics: A case study. *Numerical Heat Transfer; Part A: Applications*. 73(5): 332-346. 10.1080/10407782.2017.1420302
19. Fardsadegh, B. and Jafarizadeh-Malmiri, H. (2019). Aloe vera leaf extract mediated green synthesis of selenium nanoparticles and assessment of their in vitro antimicrobial activity against spoilage fungi and pathogenic bacteria strains. *Green Processing Synthesis*. 8(1): 399-407. 10.1515/gps-2019-0007
20. Ahmadi, O., Jafarizadeh-Malmiri, H., and Jodeiri, N. (2019). Optimization of processing parameters for hydrothermal silver nanoparticles synthesis using Aloe vera leaf extract and estimation of their physico-chemical and antifungal properties. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*. 233(5): 651-667. 10.1515/zpch-2017-1089
21. Zhao, W., Yang, Y., Bao, Z., Yan, D., and Zhu, Z. (2020). Methods for measuring the effective thermal conductivity of metal hydride beds: A review. *International Journal of Hydrogen Energy*. 10.1016/j.ijhydene.2019.12.185
22. Sayyar, Z. and Jafarizadeh-Malmiri, H. (2019). Preparation, Characterization and Evaluation of Curcumin Nanodispersions Using Three Different Methods - Novel Subcritical Water Conditions, Spontaneous Emulsification and Solvent Displacement. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*. 10.1515/zpch-2018-1152
23. Anarjan, N., Fahimdanesh, M., and Jafarizadeh-Malmiri, H. (2017). β -Carotene nanodispersions synthesis by three-component stabilizer system using mixture design. *Journal of Food Science and Technology*. 54(11): 3731-3736. 10.1007/s13197-017-2764-8

Simulating the green synthesis process of selenium nanoparticles using willow leaf extract under subcritical water conditions and evaluating their antifungal and antioxidant properties

Hamed Dindar¹, Nima Isafi¹, Sarvin Mohammadi-Aghdam², Omid Ahmadi^{3*}

1. Bachelor's degree, Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran

2. Associate Professor, Department of Chemistry, Payam Noor University, Tehran, Iran

3. Assistant Professor, Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran
o.ahmadi@uok.ac.ir :E-mail

Abstract

Background and Objective: In recent years, the development of green technologies and sustainable approaches within nanotechnology has attracted broad attention from researchers and diverse industries. These approaches emphasize using natural materials and reducing resource and energy consumption to lessen environmental impacts while supporting human health. Willow tree leaves contain bioactive compounds, such as phenolics and flavonoids, which have the ability to reduce and stabilize selenium anions during the synthesis process and can lead to the formation of nanoparticles with controlled size and shape. Simulation and modeling are among the most powerful tools enabling progress in science as well as practical applications in daily life. This study systematically explored the process of simulating the synthesis of selenium nanoparticles using willow leaf extract under subcritical water conditions, aiming to reduce cost and time while improving the predictability of outcomes. The main objective was to optimize key process parameters—such as temperature and residence time—and to evaluate the physicochemical properties and stability of selenium nanoparticles produced via simulation, using COMSOL Multiphysics. By combining green synthesis concepts with numerical modeling, the work seeks to provide a feasible computational framework to guide experimental design, process scale-up, and sustainable nanomaterial production.

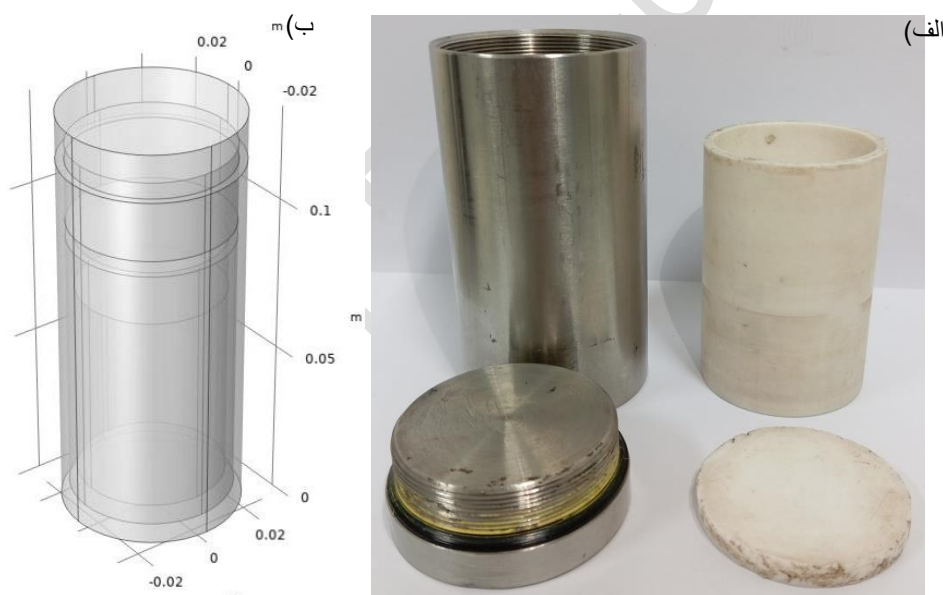
Materials and Methods: Willow leaves were washed and dried over five days to reduce moisture and microbial load. From this material, 10 g of dried, powdered leaves were added to 100 mL of boiling water and extracted for 10 minutes. The extract was filtered with Whatman paper No. 5 and stored at 4°C to preserve its integrity. For selenium nanoparticle synthesis, 10 mL of willow leaf extract were mixed with 20 mL of 10 mM sodium selenite solution. The mixture underwent hydrothermal treatment in a sealed autoclave under subcritical water conditions at 200°C for varying times from 0 to 240 minutes in 10-minute increments. This design enabled modeling and simulation of the heating process under subcritical water, aligning with green chemistry principles. Key parameters—temperature and residence time—were explored through comparative simulations across a matrix of conditions to determine their influence on nanoparticle characteristics. Evaluations included particle size distribution, polydispersity index, zeta potential, and functional attributes such as antioxidant activity and antifungal efficacy.

Results: Optimal subcritical conditions were reached at 200°C with a residence time of 80 minutes. Under these conditions, selenium nanoparticles exhibited: mean size ≈ 95 nm, polydispersity index ≈ 0.295 , and zeta potential ≈ -19.8 mV, indicating good stability and a narrow size distribution. Antioxidant activity was 42%, and antifungal activity (diffusion

method) was 76%. These results demonstrate that green synthesis under subcritical water can yield selenium nanoparticles with favorable size, stability, and functional properties for potential biomedical and agricultural applications.

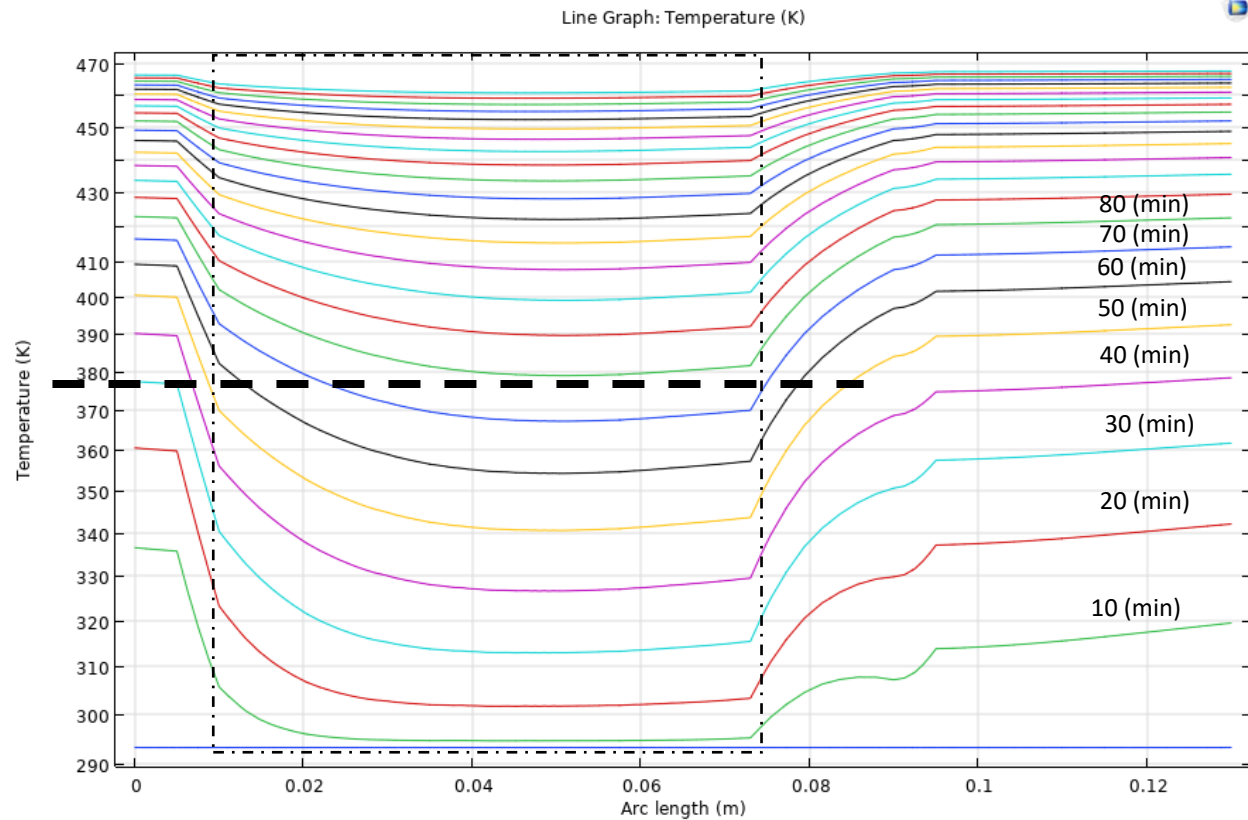
Conclusion: Simulating the green synthesis of selenium nanoparticles using willow leaf extract under subcritical water conditions is a robust approach for predicting outcomes and reducing costs and time. Temperature and time decisively affect size, stability, and bioactivity; precise tuning can produce nanoparticles with desirable traits. This modeling-guided strategy can accelerate the development of selenium nanoparticles for antifungal and antioxidant applications, while supporting sustainability and economic efficiency. The study also highlights the value of integrating experimental work with computational design to enable rapid optimization and scale-up in greener nanomaterial manufacturing.

Keywords: Selenium nanoparticles, willow leaf extract, simulation, subcritical water, antifungal, antioxidant



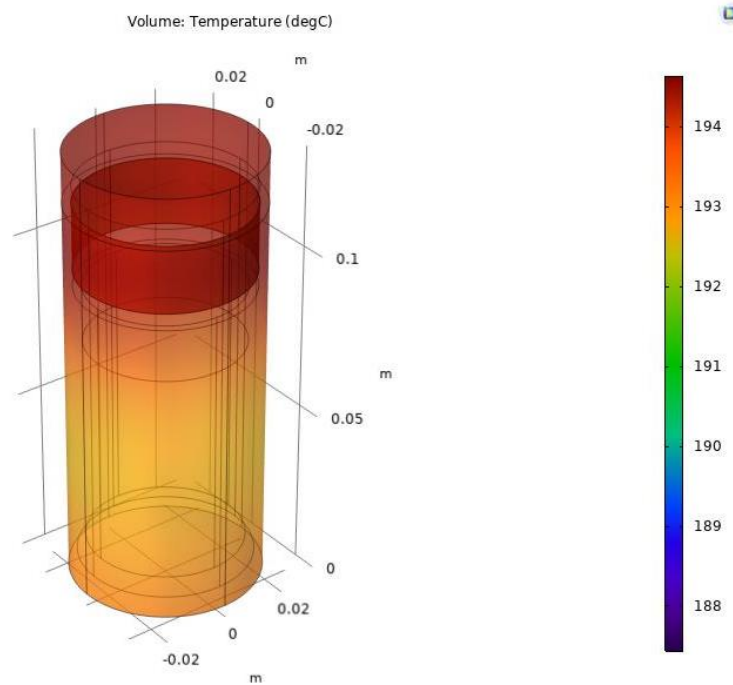
شکل ۱. الف) اتوکلاو هیدروترمال (شامل دو محفظه استوانه ای) – ب) شماتیک کلی اتوکلاو هیدروترمال اسمبل شده

Figure 1. a) Hydrothermal autoclave (consisting of two cylindrical chambers) – b) General schematic of the assembled hydrothermal autoclave



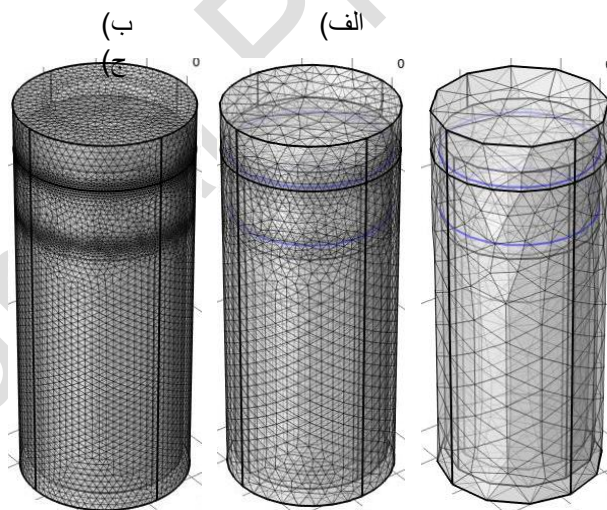
شکل ۲. حل معادله و شبیه سازی بخش های مختلف اتوکلاو هیدروترمال و نانوذرات سلنیوم در زمان های مختلف

Figure 2. Equation solution and simulation of different parts of hydrothermal autoclave and selenium nanoparticles at different times



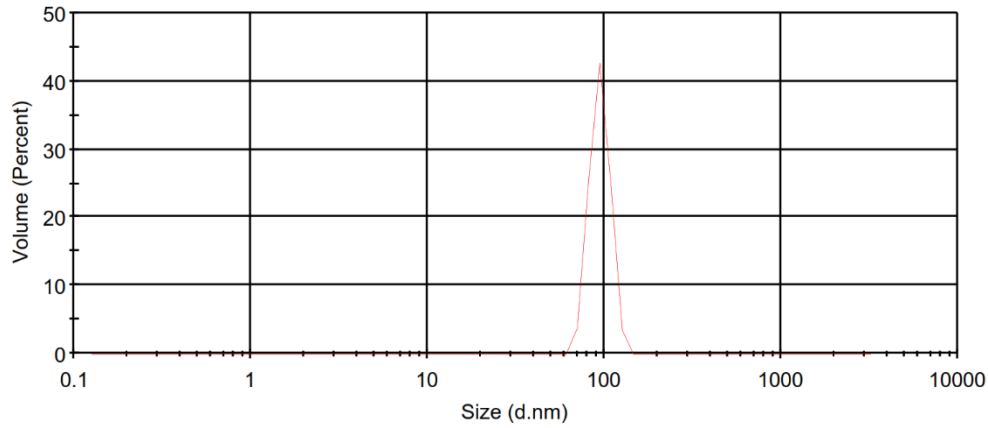
شکل ۳. شماتیک گرافیکی تغییرات دما

Figure 3. Graphical schematic of temperature changes

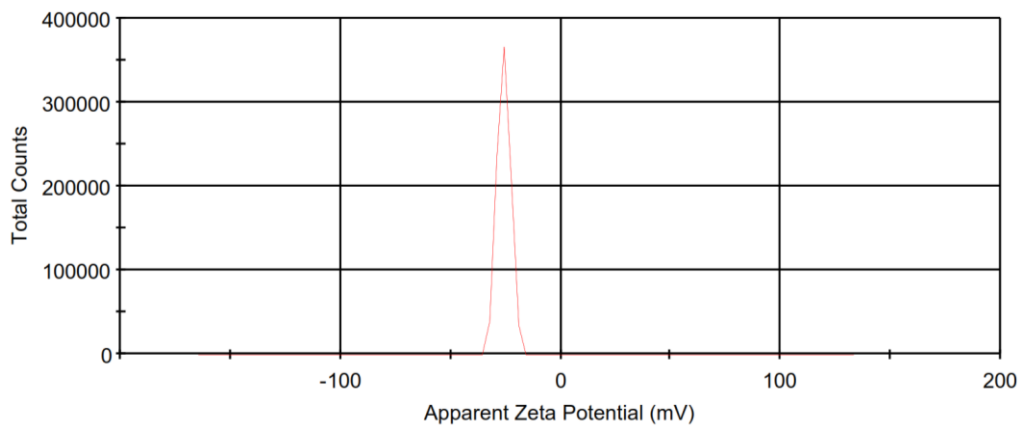


شکل ۴. گره بندی های مختلف جهت حل معادلات انتقال حرارت برای شبیه سازی اتوکلاو هیدروترمال (الف-ج)

Figure 4. Different node configurations for solving heat transfer equations for hydrothermal autoclave simulation (a-c)



شکل ۵. توزیع اندازه نانوذرات سلیوم
Figure 5. Size distribution of selenium nanoparticles.



شکل ۶. پتانسیل زتا نانوذرات سلیوم
Figure 6. Zeta potential of selenium nanoparticles

جدول ۱. ضرایب و ثوابت لازم جهت حل و مدل سیستم

Table 1. Coefficients and constants required to solve and model the system

	Teflon chamber	Steel chamber
Density ($\frac{kg}{m^3}$)	2100	7850
Specific heat capacity ($\frac{J}{Kg.K}$)	1006	550
Conductive heat transfer coefficient ($\frac{w}{m.K}$)	3.21	18
Poisson's ratio	0.49	-