**Abstract**

In this dissertation, the design and fabrication of novel CoTiO3/CuBi2O4, RGO/metal molybdates, and Bi2O3/Bi2S3/BaFe12O19 heterojunction nanocomposites and investigation of their photocatalytic activity on the degradation and removal of water pollutants have been investigated and reported for the first time. To synthesize the mentioned nanocomposites preparation approaches including sol-gel, hydrothermal, solvothermal, and combination of these methods were used. For the characterization and structural confirmation of these designed nanocomposites various characterization techniques such as the XRD, FT-IR, DRS, FESEM, EDX, XPS, BET and ICP-OES were employed. After confirming and indicating the straightforward synthesis of the prepared nanocomposites, each of them was used separately to the photocatalytic degradation of contaminants. Hence, the designed CoTiO3/CuBi2O4, RGO/metal molybdates, and Bi2O3/Bi2S3/BaFe12O19 heterojunction nanocomposites were used separately for the degradation of DR16, RhB, and tetracycline water pollutants, respectively.

To understand and address the photocatalytic performance of the prepared nanocomposites different important parameters such as pH, type of catalyst, loading of catalyst, trapping experiment (for active species), turbidity and reusability tests were scrutinized. In fact, the effect of every species in the degradation process was investigated in details. UV-Vis technique was used to detect and determine the percentages of degradation at different conditions. Moreover, to monitoring the produced intermediates and the final compounds after the irradiation process, GC-MS characterization method was employed. Photoelectrochemical and electrochemical properties of photocatalysts were examined to better implication of the photocatalytic process. Mott-Schottky plots showed different Efb and ND for different prepared photocatalysts and also effect of pH on n- or p-type behavior of heterojunction. The Nyquist and Bode plots of the samples showed an efficient separation of the photo-generated electrons and holes, lifetime and confirmed the existence of small surface resistance for prepared photocatalysts. To investigate the major involved species in the photocatalytic system, the trapping experiments were performed. Reusability and stability evaluation tests were reported.

**Keywords:**Semiconductor, photocatalyst, heterojunction, nanocomposite, CoTiO3/CuBi2O4, RGO/metal molybdates, Bi2O3/Bi2S3/BaFe12O19.

**چکیده**

در این پایان نامه، نانو کامپوزیت های هتروجانکشن CoTiO3/CuBi2O4, RGO/ metal molybdates و Bi2O3/Bi2S3/BaFe12O19 طراحی، و سنتز شده و برای اولین بار فعالیت فوتوکاتالیستی آنها در تخریب و حذف آلاینده های آبی بررسی و گزارش شده است. جهت سنتز نانوکامپوزیت های ذکر شده روش های مختلفی مانند سل-ژل، هیدروترمال، سولوترمال و ترکیبی از این روش ها استفاده شده است. برای شناسایی و تأیید ساختاری نانوکامپوزیت های طراحی شده تکنیک های شناسایی مختلفی مانند XRD, PL, FT-IR, DRS, FESEM, EDX, XPS, BET و ICP-OES به کار گرفته شده است. بعد از تأیید سنتز نانوکامپوزیت های هتروجانکشن CoTiO3/CuBi2O4, RGO/metal molybdates و Bi2O3/Bi2S3/BaFe12O19 هر کدام به ترتیب و جداگانه برای تخریب آلاینده های آبی DR16 ، RhB و تتراسایکلین استفاده شده اند.

برای درک کارآیی فوتوکاتالیستی نانوکامپوزیت های سنتز شده پارامترهای مختلفی مانند pH، نوع کاتالیست، مقدار بارگذاری کاتالیست، آزمایش تله اندازی (به منظور تشخیص گونه های فعال مؤثر)، کدورت سنجی و تست بازیافت مورد بررسی قرار گرفته است. در واقع، تأثیر هر نانوکاتالیست در فرآیند تخریب با جزئیات مورد بررسی قرار گرفته است. تکنیک UV-Vis جهت تشخیص و تعیین درصدهای تخریب در شرایط مختلف استفاده شده و علاوه بر این، برای نظارت بر حد واسط های تولید شده و ترکیبات نهایی بعد از فرآیند تابش روش شناسایی GC-MS به کار گرفته شده است. جهت درک بهتر فرآیند فوتوکاتالیستی خواص الکتروشیمیایی و فوتوالکتروشیمیایی فوتوکاتالیست ها مورد ارزیابی قرار گرفتند. نمودارهای مات-شاتکی، برای محاسبه ی ND و Efb فوتوکاتالیست های متفاوت تهیه شده و همچنین تأثیر pH بر n و یا p بودن رفتار هتروجانکشن را نشان داده اند. نمودار های Nyquist و Bode نمونه ها، جدایش مؤثر حفره-الکترون های تولید شده توسط نور، زمان آسایش و نیز تأثیر وجود مقاومت سطحی کوچک برای فوتوکاتالیست های آماده شده را نشان می دهد. برای بررسی گونه های اصلی درگیر در سیستم فوتوکاتالیستی، آزمایشات تله اندازی انجام شده و تست های ارزیابی بازیافت و پایداری نانوکاتالیست ها نیز گزارش شده است.

**واژه های کلیدی:** نیمه رسانا، فوتوکاتالیست، هتروجانشکن، نانوکامپوزیت، CoTiO3/CuBi2O4, RGO/metal molybdates, Bi2O3/Bi2S3/BaFe12O19.