

ВЛИЯНИЕ АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ НА ПРОЦЕСС АДСОРБЦИИ

И.А. Какорин, студент
Волгоградский государственный университет
(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2023-5-5-43-46

Аннотация. В работе представлены теоретические исследования процесса адсорбции молекулы на поверхности углеродной нанотрубки (6,6). Исследованы различные варианты расположения фрагмента над поверхностью УНТ. Установлено, что на процесс адсорбции оказывают влияние первоначальное расположение молекулы над трубкой. Расчеты выполнялись с помощью квантово-химического метода MNDO.

Ключевые слова: адсорбция, активные центры, углеродная нанотрубка, метод MNDO.

Адсорбция – это процесс, при котором молекулы прилипают к поверхности твердого или жидкого материала. Он играет решающую роль в различных промышленных и экологических приложениях, таких как очистка воды, разделение газов, катализ и доставка лекарств. Эффективность и результативность адсорбции зависят от нескольких факторов, в том числе от наличия центров адсорбции. Адсорбционные центры – это особые места на поверхности адсорбирующего материала, где молекулы могут связываться и накапливаться [1].

Центры адсорбции, также известные как активные центры или центры связывания, представляют собой локализованные области на поверхности адсорбирующего материала, где молекулы адсорбата взаимодействуют и прикрепляются друг к другу. Эти центры могут быть в виде атомных или молекулярных узлов, дефектов или неровностей поверхности. Природа и распределение центров адсорбции существенно влияют на адсорбционную емкость, селективность и кинетику процесса.

Центры адсорбции определяют площадь поверхности, доступную для адсорбции. Материалы с большей площадью поверхности, такие как пористые материалы, такие как активированный уголь или цеолиты, имеют большее количество адсорбционных центров, что приводит к повышенной адсорбционной способности. Наличие центров адсорбции в порах этих материалов дополнительно увеличивает их способность захватывать и удерживать молекулы адсорбата.

Сила взаимодействия между адсорбционным центром и молекулой адсорбата определяет адсорбционную способность и селективность.

Адсорбционные центры с более сильными силами связывания проявляют более высокое сродство к определенным молекулам, что обеспечивает селективную адсорбцию. Это свойство имеет решающее значение в таких приложениях, как разделение и очистка газов. Понимание распределения и силы центров адсорбции имеет решающее значение для разработки адсорбентов, адаптированных для конкретных применений.

Катализаторы полагаются на центры адсорбции для облегчения химических реакций. Наличие специфических центров адсорбции на поверхности катализатора усиливает адсорбцию молекул реагентов, что приводит к увеличению скорости реакции и повышению эффективности. Изучение адсорбционных центров является постоянной областью исследований, в которой ученые изучают различные материалы, модификации поверхности и методы определения характеристик, чтобы понять и оптимизировать процессы адсорбции. Адаптируя свойства центров адсорбции, исследователи могут улучшить селективность, емкость и кинетику адсорбции, что приведет к более эффективному и устойчивому применению [2-3].

Рассмотрим зависимость процесса адсорбции молекулы $C_{15}H_{6}O_7$ к поверхности УНТ при приближении различными активными центрами. Рассматривалось три

положения при которых молекула приближается к поверхности трубки различными активными центрами [4-6]:

1) кислород-группа ОН, 2) углерод-кислород, 3) водород-углерод-водород (рис. 1).

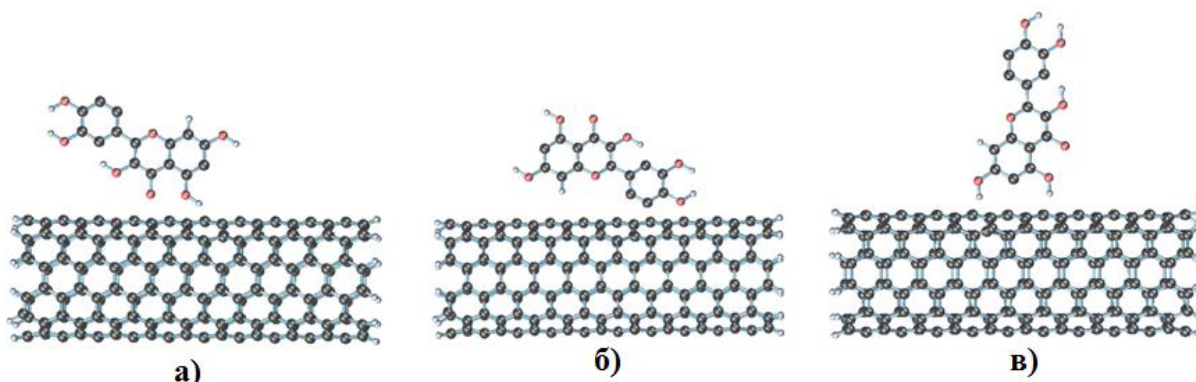


Рис. 1. Расположение молекулы $C_{15}H_6O_7$ над поверхностью УНТ различными активными центрами: а) кислород-группа ОН; б) углерод-кислород; в) водород-углерод-водород

Пошаговое приближение $C_{15}H_6O_7$ к трубке позволило построить профиль поверхности потенциальной энергии системы «УНТ – молекула $C_{15}H_6O_7$ » (рис. 2).

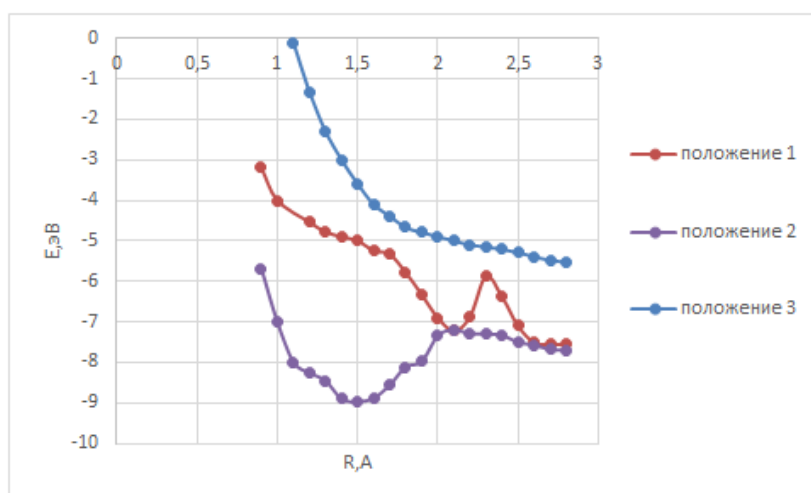


Рис. 2. Профиль поверхности потенциальной энергии взаимодействия $C_{15}H_6O_7$ с углеродной нанотрубкой (6,6)

Приближение молекулы к тубулену активными центрами кислород-группа ОН показало, что на расстоянии 2 \AA наблюдается физическая адсорбция (рис. 3а), значение которой равно $7,2 \text{ эВ}$, при этом что бы произошло данное взаимодействие молекуле необходимо преодолеть энергетический барьер величиной $1,62 \text{ эВ}$. Энергии активации и энергии адсорбции вычислялись как разность между полной энергией $E(R)$ системы «УНТ – структурная единица» на соответствующем расстоянии R и полной энергией системы на $R = \infty$:

$$E_i = E(R_i) - E(\infty), \text{ где } i = \text{а, ад.}$$

При расположении молекулы в положении 2, а именно, атаки углеродной нанотрубки атомами углерода и кислорода молекулы на расстоянии $1,5 \text{ \AA}$, наблюдается образование химической связи между атомом углерода молекулы и атомом УНТ, величина энергии адсорбции равна $8,97 \text{ эВ}$. Адсорбция приводит к деформации поверхности углеродной нанотрубки (рис. 3б). В положении 3 адсорбция молекулы не происходит (рис. 3в).

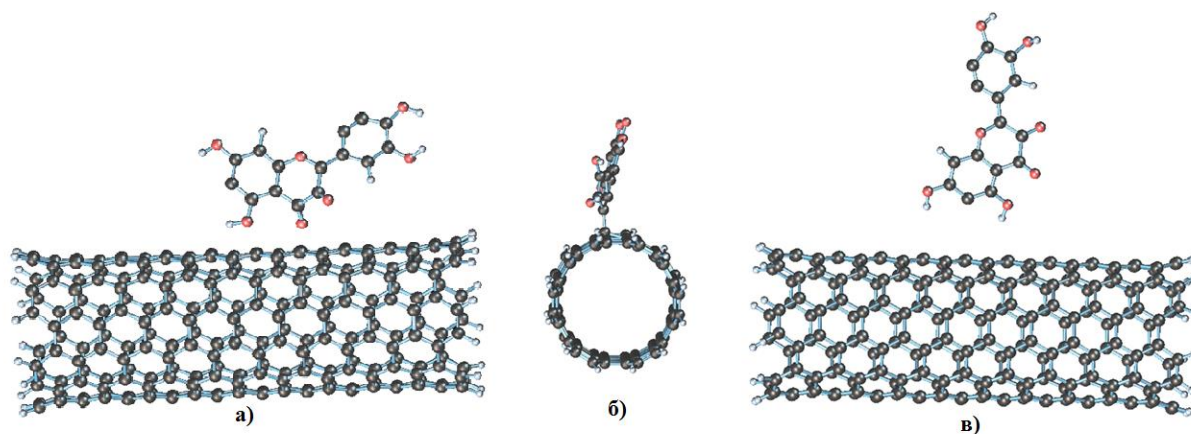


Рис. 3. Взаимодействие молекулы $C_{15}H_6O_7$ с УНТ: а) активными центрами кислород-группа OH; б) активными центрами кислород-углерод; в) активными центрами водород-углерод-водород

Заключение: изучен механизм присоединения молекулы $C_{15}H_6O_7$ к поверхности однослойной УНТ типа (6,6). Исследованы различные адсорбционные центры молекулы. Установлено, что на процесс адсорбции оказывает влияние выбор ад-

сорбционного центра. Самыми активными центрами являются атомы углерода адсорбирующей структуры. Таким образом, влияние адсорбционных центров на процесс адсорбции неоспоримо.

Библиографический список

1. Исследование адсорбции энантиомеров гистидина на углеродных нанотрубках в водном растворе на основе различных моделей адсорбции / Д.Т. Ле, Е.В. Бутырская, А.А. Волков, А.С. Гнеушев // Сорбционные и хроматографические процессы. – 2022. – Т. 22, № 3. – С. 235-242. – DOI 10.17308/sorpchrom.2022.22/9330.
2. Агеев, А.А. Адсорбция поверхностно-активных веществ: монография / А.А. Агеев, В.А. Волков. – Москва: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Московский государственный университет дизайна и технологии", 2015. – 222 с. – ISBN 978-5-87055-238-5.
3. Нанотубулярные композиты и их полуэмпирические исследования / И.В. Запороцкова, Е.В. Перевалова, Е.В. Прокофьева, О.А. Давлетова // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2006. – №2. – С. 4-14.
4. Исследование процесса адсорбции биологически активных веществ, содержащих дифенилоксидный фрагмент, на внешней поверхности углеродных нанотрубок / А.А. Кравченко, Т.А. Ермакова, И.В. Запороцкова [и др.] // На стыке наук. Физико-химическая серия : Материалы II Международной научной Интернет-конференции: в 2 томах; составитель Д.Н. Синяев, Казань, 28 января 2014 года / Сервис виртуальных конференций Raх Grid; ИП Синяев Дмитрий Николаевич. Том 2. – Казань: Индивидуальный предприниматель Синяев Дмитрий Николаевич, 2014. – С. 4-7.
5. Theoretical studies of the structure of the metal-carbon composites on the base of acrylonitrile nanopolymer / I.V. Zaporotskova, L.V. Kojitov, O.A. Davletova [et al.] // Журнал нано- и электронной физики. – 2014. – Vol. 6, № 3. – P. 03035.
6. Давлетова, О.А. Адсорбционные свойства однослойного и многослойного пиролизованного полиакрилонитрила / О.А. Давлетова, И.В. Запороцкова // Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 10: Инновационная деятельность. – 2010. – № 4. – С. 37-41.

INFLUENCE OF ACTIVE CENTERS ON THE ADSORPTION PROCESS

I.A. Kakorin, *Student*
Volgograd State University
(Russia, Volgograd)

Abstract. *The paper presents theoretical studies of the adsorption process of a molecule on the surface of a carbon nanotube (6,6). Various variants of the fragment's location above the CNT surface have been investigated. It was found that the adsorption process is influenced by the initial location of the molecule above the tube. Calculations were performed using the MNDO quantum chemical method.*

Keywords: *adsorption, active centers, carbon nanotube, MNDO method.*