

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УГЛЕРОДНОГО НАНОМАТЕРИАЛА ДЛЯ ОЧИСТКИ ПИТЬЕВОЙ ВОДЫ

Добрынин А.Я., Серова М.В., Ермакова Т.А., Давлетова О.А.,
Поликарпова Н.П., Запороцкова И.В.

Волгоградский государственный университет

54c103f8496a9

Растущая потребность человечества в питьевой воде заставляет создавать новые более экономически выгодные технологии очистки воды. Углеродные нанотрубки (УНТ) являются сегодня материалом практического применения благодаря их высокой удельной поверхности, превышающей в несколько раз удельную поверхность лучших современных сорбентов, что открывает возможность их использования для очистки газообразных и жидких веществ от примесей. Углеродные нанотрубки могут адсорбировать примеси как на внутренней, так и на внешней поверхности, что позволяет проводить более селективную адсорбцию. В связи с вышесказанным предлагается использовать углеродные нанотрубки для очистки питьевой воды от примесей неорганической природы.

В работе выполнены квантово-химические исследования адсорбционного взаимодействия углеродных нанотрубок с хлоридами, сульфатами, карбонатами кальция с помощью метода DFT и программного пакета Gaussian09. В качестве адсорбента была выбрана модель УНТ типа armchair (6,6). Расширенная элементарная ячейка содержала четыре слоя гексагонов вдоль цилиндрической оси. Границы кластера замыкались псевдоатомами, в качестве которых были выбраны атомы водорода. Молекулы исследуемого вещества приближались адсорбционными центрами к УНТ с шагом 0,1 Å. Были рассмотрены три варианта ориентации адсорбционного центра молекул над поверхностью трубки: 1) над атомом углерода, 2) над центром связи C-C, 3) над центром углеродного гексагона. Выполненные расчеты позволили построить профиль поверхности потенциальной энергии взаимодействия и установить факт реализации адсорбционного взаимодействия солей кальция с углеродными нанотрубками. Анализ результатов показал, что соединения кальция адсорбируются на внешней поверхности УНТ только в положении 1 (над атомом углерода). При этом молекулы, атакуя поверхность трубки, присоединяются безбарьерно. В каждом случае