

energy = 56094.44348, exchange-Corr. Energy = -1788.31012, nuclear repulsion energy = 32779.31971.

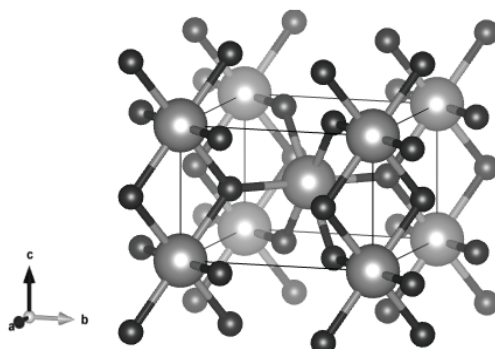


Fig. 1. The 49-atom SnO₂ cluster.

The approximate accuracy of numerical integration used to estimate the exchange-correlation contribution to the density functional was 1×10^{-5} . Since the calculations were performed iteratively, the main convergence criteria of calculations was the energy difference between the two iterations – less than 5×10^{-6} .

ЛИТЕРАТУРА

1. http://lms.physics.spbstu.ru/pluginfile.php/689/mod_resource/content/4/QTMPS_Part_02.pdf.
2. <https://kau.org.ua/images/Romanskiy.pdf>.
3. Сатанин, А.М. Введение в теорию функционала плотности / А.М. Сатанин. Нижний Новгород, 2009.
4. Valiev M., Bylaska E.J., Govind N., et al., "NWChem: a comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations" *Comput. Phys. Commun.* 181, 1477 (2010), doi:10.1016/j.cpc.2010.04.018.
5. <https://github.com/nwchemgit/nwchem/wiki>.

УДК 661.183.122

Тивоненко А.В., студент
Донцова Т.А., к.х.н., доцент
(КПИ им. Игора Сикорского, Киев, Украина)

АНАЛИЗ КИСЛОТНО ОСНОВНЫХ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ АКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ

Среди сорбционных материалов, которые обладают большой удельной поверхностью и достаточно высокими сорбционными свойствами, наиболее известными являются активированные угли.

Тем не менее, было показано, что сочетание активированного угля с другими компонентами, например, нанодисперсными оксидами металлов, в частности оксидом циркония, приводит к появлению синергетического эффекта в его сорбционных свойствах [1]. Поэтому, с нашей точки, представляет значительный интерес получение и исследование свойств таких нанокompозитов. Среди многих характеристик сорбентов поверхностная является одной из самых важных, среди которых кислотно-основные свойства занимают лидирующее место.

Целью данной работы было исследование кислотно-основных свойств чистой фазы оксида циркония, активированного угля и композита на их основе.

Исследование распределения поверхностных кислотно-основных центров по кислотно-основным свойствам проводили методом Гаммета с помощью 9 индикаторов со значениями рКа в диапазоне -0,29...12,8. Для этого на спектрофотометре Spectrophotometer UV/VIS измеряли оптическую плотность исходных растворов индикаторов (D_0). Затем готовили суспензии сорбентов в этих растворах и после установления адсорбционного равновесия и последующего декантирования определяли оптическую плотность (D_1). Для учета влияния изменения рН среды на оптическую плотность при контакте раствора с сорбентом готовили аналогичные суспензии в дистиллированной воде, через 120 минут в декантат добавляли раствор индикатора и измеряли оптическую плотность (D_2). Оптическую плотность растворов определяли в стеклянных кюветах (10 мм) при длине волны соответствующей максимуму поглощения раствора индикатора. Содержание активных центров определенной кислотной силы (q , ммоль/г) рассчитывали по формуле [2]:

$$q = \frac{C_i \cdot V_i}{D_0} \cdot \left[\frac{|D_0 - D_1|}{m_1} \pm \frac{|D_0 - D_2|}{m_2} \right],$$

где C_i and V_i концентрация и объем индикатора, мкг/л и л соответственно; m_1 and m_2 – масса образца при измерении D_1 and D_2 , г.

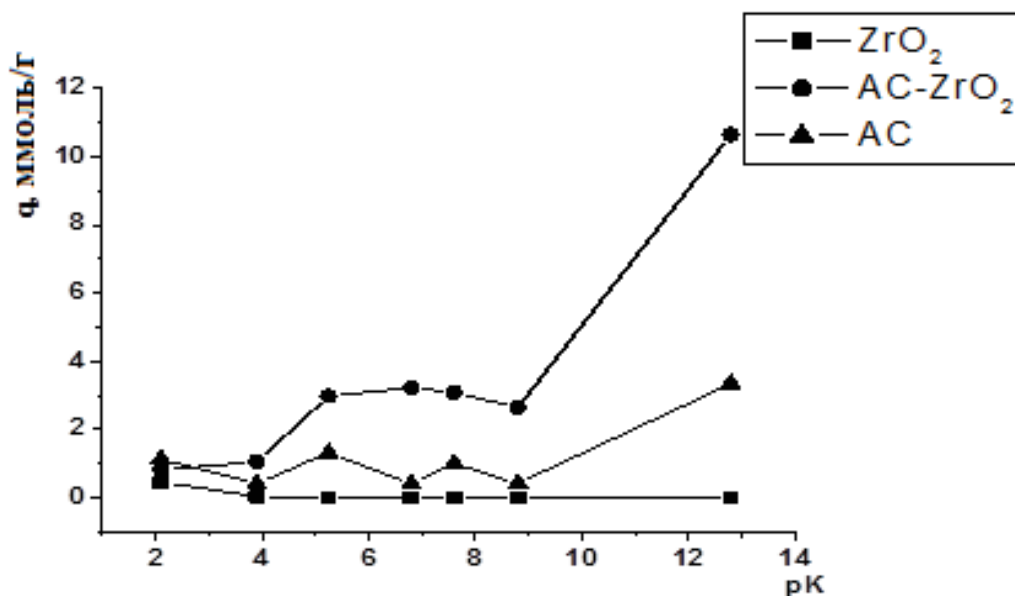


Рисунок 1 – Распределение центров адсорбции на поверхности оксида циркония, активированного угля и композита на их основе.

Как видно из рисунка 1, образец оксида циркония практически не имеет кислотно-основных центров в диапазоне рК 2-13 и их сумма составляет всего лишь 0,49 ммоль/г. Образец активированного угля содержит общее количество активных центров – 8,03 ммоль/г, а нанокompозит на их основе – 25,15 ммоль/г. Это практически в 3 раза больше чем у активированного угля. Таким образом, синергетический эффект, наблюдаемый при создании нанокompозитов обусловлен в первую очередь увеличением количества их кислотно-основных свойств.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fedenko, Yu. M., Dontsova, T.A., Astrelin I.M. Physicochemical and sorptive properties of nanocomposites based on zirconium (IV) oxide // Chemistry and Chemical Technology, 1, 2014.
2. Сычев М.М., Минакова Т.С., Слизов Ю.Г., Шилова О.А. Кислотно-основные характеристики поверхности твердых тел и управление свойствами материалов и композитов. – СПб.: Химиздат, 2016.