

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАСЧЕТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ НОВЫХ СОРБЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Земскова Л.А., Войт А.В.

*Институт химии Дальневосточного отделения Российской Академии Наук,
690022, Владивосток, проспект 100-летия Владивостока, 159,
e-mail: avoit@ich.dvo.ru*

Большинство используемых в настоящее время функциональных материалов, в частности сорбционных, являются композиционными. Композиционные сорбенты состоят как минимум из двух компонентов: цеолиты или углеродные носители, покрытые каким-либо неорганическим ионообменником, ионообменные смолы, наполненные оксидами металлов, и прочее. Использование композиционных сорбентов из природных биополимеров, например, полисахарида хитозана, и его производных, привлекает особое внимание, так как такие сорбенты являются дешевыми и эффективными по сравнению, например, с активными углями, и могут составить конкуренцию в перспективе ионообменным смолам. Композитные сорбенты, имеющие в своем составе хитозан и оксиды многих металлов (Al, Fe, Ti, Mn, Mo) находят применение для удаления многих органических загрязнителей, тяжелых металлов и мышьяка. Однако, основные методы, используемые для получения таких сорбентов, являются эмпирическими, основанными на большой практике их применения.

В данной работе проведены квантовохимические расчеты взаимодействия хитозана с гелирующими агентами – сульфат и молибдат-ионами, приводящими к осаждению хитозана, в том числе на подложку для получения сорбентов методом ионного гелирования и оценка взаимодействия гелирующих агентов с извлекаемым арсенат-ионом. Для оценки взаимодействия цепей полимера и гелирующих ионов использован метод функционала плотности. Показано, что сульфат и молибдат-ионы могут быть ионными гелирующими агентами, их гелирующая способность примерно одинакова. Расчеты также показали, что влияние модификации сульфат- и молибдат-ионами на прочность сорбционного комплекса AsO_4^{3-} - хитозан невелико, что является дополнительным аргументом в пользу того, что изменение сорбционной способности модифицированного хитозана по отношению к мышьяку обусловлено, главным образом, изменением его структуры и дополнительным взаимодействием арсенат-иона с оксимolibдатами.

Результаты получены с использованием оборудования ЦКП "Дальневосточный вычислительный ресурс" ИАПУ ДВО РАН (<https://cc.dvo.ru>).

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии Дальневосточного отделения РАН (№ 0265-2018-0001).