

Углеродные нанотрубки, модифицированные бором - фильтр ядовитых газов

Борознин С.В.¹, Запороцкова И.В.¹, Борознина Н.П.¹, Запороцков П.А.¹

boroznin@volsu.ru

¹ Волгоградский государственный университет, Волгоград, Россия

Углеродные нанотрубки являются новым материалом, чьи сорбционные свойства могут быть полезны при использовании в качестве фильтрующего материала. Для улучшения сорбционной способности исследователями предлагаются модификации наноструктур, самая перспективная из которых - замещение атомами бора углерода [1].

Для модельного эксперимента были изучены углеродные нанотрубки, содержащие 25 % замещающих атомов бора, в которых атомы В были связаны друг с другом парами в гексагоне. К ним присоединялись путем пошагового приближения молекулы оксида серы (IV) и фосгена. Можно предположить наиболее вероятные адсорбционные центры при взаимодействии углеродной боросодержащей нанотрубки с молекулами вредных газов: I) и II) атомы поверхности ВСЗ нанотрубок (С для первого варианта и В для второго), III) центр связи между атомами в нанотрубке. Визуализация одного из этапов исследования представлена на рисунке 1.

В результате проведенных исследований было установлено, что молекула оксида серы (IV) и фосгена успешно адсорбируется на поверхности углеродных нанотрубок с замещающими атомами бора. Расстояние адсорбции составляет около 3,3 А, энергия адсорбции в случае молекулы оксида серы (IV) = 1,4 эВ, для молекулы фосгена = 2,4 эВ. При этом, наиболее вероятными сорбционными центрами выступают атомы бора поверхности нанотрубки, либо центр связи между атомами бора и углерода. Таким образом, в ходе модельного эксперимента была теоретически доказана возможность использования углеродных нанотрубок, модифицированных замещающими атомами бора, в качестве фильтров ядовитых газов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема "FZUU-2023-0001").

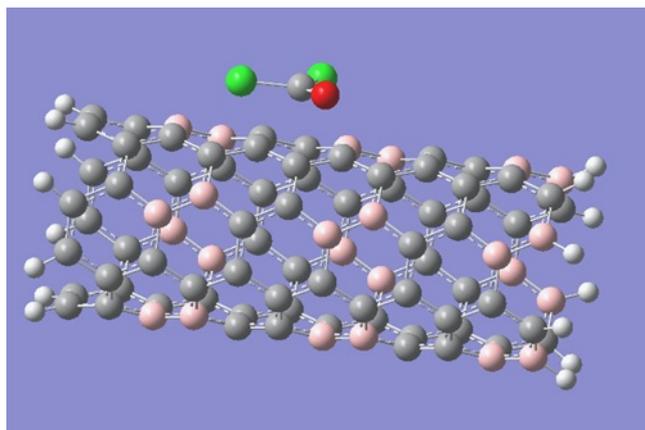


Рис. 1. Модель комплекса, состоящего из взаимодействующих нанотрубки и молекулы фосгена

ССЫЛКИ

1. S.V. Sawant, A.W. Patwardhan, J.B. Joshi, K. Dasgupta. Chemical Engineering Journal (2022) 427, 131616.