

Построение моделей, формирующихся при синтезе сульфидных композиционных материалов на основе модифицированного кремнезема

© **Бараева Линара Рифатовна,⁺ Ахметова Резида Тимерхановна*
и Юсупова Алсу Ансаровна***

*Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 224-78-26. E-mail: baraeva.linara@yandex.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *сульфидные композиционные материалы, активный кремнезем, хлорид железа, хемосорбция.*

Аннотация

С использованием программы *Priroda basis4* построены модели сульфидных композиционных материалов на основе кремнезема, модифицированного хлоридом железа. Показано, что хлорид железа способствует дестабилизации серных циклов и активизирует их разрыв. В результате образуются полимерные серные цепи, более реакционноспособные по сравнению со стабильными в обычных условиях циклическими молекулами серы. Проведено исследование сшивающей способности серы при объединении двух силикагелевых кластеров.