

Исследование адсорбции мономолекулярного слоя воды на карбонате кальция методами теории функционала плотности

© Дегтярев^{1*} Андрей Александрович, Тараканов²⁺ Александр Геннадьевич
и Тришина³⁺ Александра Викторовна

¹ Кафедра «Химия и химические технологии». Тамбовский государственный технический университет. ул. Советская, 106. г. Тамбов, 392000. Россия. Тел.: (4752) 63-44-44.

E-mail: ad.dycost@gmail.com

² Кафедра «Химия и химические технологии». Тамбовский государственный технический университет. ул. Советская, 106. г. Тамбов, 392000. Россия. Тел.: (4752) 63-44-44.

E-mail: uazqaaz@gmail.com

³ Кафедра «Химия и химические технологии». Тамбовский государственный технический университет. ул. Советская, 106. г. Тамбов, 392000. Россия. Тел.: (4752) 63-44-44.

E-mail: koroleva_tambov@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: адсорбция, активные центры, DFT, карбонат кальция, кальцит, BSSE, вода.

Аннотация

В работе исследован механизм, геометрические и энергетические характеристики процесса сорбции влаги на поверхности (110) кальцита, являющегося одной из самых распространенных кристаллических модификаций карбоната кальция, в частности является основной составляющей такого минерала как мел.

Проведены расчеты кластера $(\text{CaCO}_3)_{20}$ с фиксированной структурой, соответствующей кристаллической структуре кальцита и имеющего развитую поверхность типа (110). Площадь поверхности (110) составила 147.5 \AA^2 .

Проведены исследования сорбции 5 и 6 молекул воды на кластере $(\text{CaCO}_3)_{20}$. Геометрия кластера была фиксированной, положение молекул воды оптимизировалось.

Использовались следующие расчетные методы: полуэмпирический метод PM7 для первичных расчетов, чистые DFT методы с функционалом PBE для расчета геометрии системы, DFT с гибридным функционалом B3LYP5 и полноэлектронным базисом 6-31G(d,p) для расчета геометрии и энергии системы. При расчете энергии адсорбции учитывалась поправка BSSE.

Проведено сравнение точности расчета геометрии системы для быстрых методов (полуэмпирического PM7 и чистых DFT методов с различными базисами) по сравнению с DFT/B3LYP5/6-31G(d,p).

В результате исследования были определены конфигурация активных центров поверхности (110) кальцита, участвующих в адсорбции молекул воды и энергия сорбции воды для различных конфигураций взаимодействия с активным центром.