

Исследование сорбционной активности фталоцианина меди

© Дегтярев^{1*} Андрей Александрович, Тришина² Александра Викторовна
и Тараканов³ Александр Геннадьевич

*Кафедра «Химия и химические технологии». Тамбовский государственный
технический университет. ул. Советская, 106. г. Тамбов, 392000. Россия.*

Тел.: ¹⁾ (960) 660-82-93; ²⁾ (920) 484-31-85; ³⁾ (953) 717-46-83.

E-mail: ¹⁾ ad.dycost@gmail.com; ²⁾ koroleva_tambov@mail.ru; ³⁾ uazqaaz@gmail.com

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: адсорбция, активные центры, DFT, фталоцианин меди, молекулярный электростатический потенциал, теория граничных орбиталей, дипольный момент.

Аннотация

В работе проведено исследование сорбционной способности фталоцианина меди по отношению к полярным сорбтивам методом квантово-химического моделирования. В качестве расчетного метода был выбран теории функционала плотности с гибридным функционалом B3LYP5 и базисными наборами 6-31G(d,p) (оптимизация геометрии) и cc-pVDZ (одноточечный расчет). Целью работы было теоретическое предсказание эффективности ПАВ при гидрофобизации поверхности фталоцианина меди (необходимо для процесса фляшинга).

Моделирование сорбционной активности было осуществлено на одиночной молекуле фталоцианина меди и на бимолекулярном комплексе с геометрией, соответствующей кристаллической решетке β-модификации.

Прогнозирование сорбционной активности осуществлялось методами дипольных моментов, молекулярного электростатического потенциала и теории граничных орбиталей.

В результате моделирования были установлены электрофильные свойства всей поверхности фталоцианина меди, но сорбция нуклеофильных молекул возможна только на поверхностях, содержащих индольные кольца. На других поверхностях возможна сорбция небольших электрофильных частиц, типа OH⁻.

Наиболее вероятными центрами сорбции представляются атомы азота индольного кольца (подтверждается всеми тремя методами).

По результатам исследования, наиболее эффективными ПАВ для гидрофобизации поверхности фталоцианина меди представляются нуклеофильные молекулы, дающие кислую либо нейтральную среду.