

**ПОДБОР СОРБЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ СИСТЕМ
АКН – ХИТОЗАН**

Тымчук А.Ф., Вытычак Е.А.

Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова, Tymchuk@onu.edu.ua

Ранее нами были проведены исследования по определению возможности формального применения некоторых моделей сорбции к системам хитин – алкилсульфат натрия и хитин – хлорид алкилпиридиния. Это известная теория мономолекулярной адсорбции Лэнгмюра, модель адсорбции Хилла – де Бура, теории адсорбции Брунауэра-Эммета-Теллера и Харкинса-Юра, учитывающие представления о многослойной адсорбции. Подбор наиболее подходящих моделей для описания сорбционных процессов с учетом рассматриваемой границы раздела фаз в значительной мере облегчает использование элементов компьютерного моделирования. Целью работы явилось продолжение данных исследований на примере систем хитозан - алкилкарбоксилат натрия.

Математическую обработку экспериментальных изотерм сорбции осуществляли путем их линеаризации с последующим использованием программы «Langmuir». В качестве сорбента использовали высокомолекулярный хитозан, полученный из панцирей ракообразных, в качестве сорбатов – анионные поверхностно-активные вещества (ПАВ) – ряд алкилкарбоксилатов натрия с длиной углеводородных радикалов от 12 до 18 атомов углерода.

Хитозан - деацетилированная производная хитина – 2-амино – 2-дезоксид – β - D-глюкан. Деацетилирование обычно проводят в довольно жестких условиях обработкой концентрированным раствором щелочи при температурах до 150⁰С в течение нескольких часов. Хитозан представляет собой аморфно-кристаллический полимер, число структурных модификаций достигает 6, растворим в разбавленных органических кислотах, обладает свойствами полиэлектролита. Предварительную подготовку хитозана проводили следующим образом: измельчали его на планетарной монмельнице “Pulverisette 6” с последующим рассеиванием по фракциям с помощью вибрационной просеивающей машины “Analysette 3”. Для исследований была отобрана фракция с размером частиц (1 – 1,5) 10⁻⁵м. Сорбцию проводили в статических условиях в течение одного часа, достаточного, как было показано кинетическим опытом, для установления сорбционного равновесия.

Экспериментально полученные изотермы сорбции ряда анионных ПАВ относятся к L – типу согласно классификации Гильса. Из всех рассмотренных уравнений для описания сорбции АКН, применимо уравнение Лэнгмюра на первоначальном участке изотерм, применимы уравнения Хилла – де Бура и БЭТ в более широком интервале концентраций. Уравнение Хилла – Де Бура выполнимо при средних степенях заполнения сорбента. Выбор сорбционной модели позволил рассчитать параметры, характеризующие процесс сорбции. Параметр κ_1 , учитывающий взаимодействие молекул ПАВ с поверхностью хитозана, лежит в пределах 0,10 – 0,42, с увеличением длины углеводородного радикала АКН незначительно усиливается взаимодействие молекул ПАВ с поверхностью сорбента. Параметр κ_2 , характеризующий ассоциацию молекул на поверхности сорбента, рассчитанный по уравнению Хилла – де Бура, не превышает 9,2, что говорит в пользу когезии средней силы. Для исследуемых систем использование программы «Langmuir» дает удовлетворительное соответствие величин констант сорбционного равновесия κ_1 и предельной сорбции A_∞ , рассчитанных различными методами.

Таким образом, формальное применение уравнений сорбции с использованием компьютерных расчетов показывает, что для систем хитозан – АКН целесообразно использовать несколько уравнений, учитывающих как дополислойную, так и полислойную сорбцию, наблюдающуюся в исследуемых системах.