

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТРЕХМЕРНЫХ МОЛЕКУЛ, ОБРАЗОВАННЫХ ЗА СЧЕТ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ, ПРИ ИХ АДСОРБЦИИ КОМПОЗИЦИОННЫМ МАТЕРИАЛОМ НА ОСНОВЕ ТПЭ

О.В. Кибальникова

Саратовский государственный технический университет

e-mail: 102970@rambler.ru

Процесс сорбции газов изучался методом газовой хроматографии с использованием пламенно-ионизационного детектора. Режим при изучении сорбции ацетона: T_d - 150°C; $T_{исп.}$ - 56°C; $T_{кол.}$ - 70°C. Время удерживания изомеров ацетона: t_1 - 0,42 с., t_2 - 0,53 с. Режим при изучении сорбции бутилового эфира уксусной кислоты: T_d - 150°C; $T_{исп.}$ - 130°C; $T_{кол.}$ - 150°C. Время удерживания изомеров ацетона: t_1 - 0,55 с., t_2 - 1 м 10 с. На хроматограммах фиксировались два пика образования таутомеров обоих газов. Взаимный переход изомерных форм осуществляется за счет каталитического процесса, связанного с синхронным переносом электрона и протона.

Для расчета параметров атом-атомной потенциальной функции (ААП) межмолекулярного взаимодействия атомов сорбата с атомами ТПЭ выбран потенциал в форме модели Леннард-Джонса:

$$\varphi = -Cr^{-6} + Br_1^{-12}$$

Параметры сил притяжения рассчитаны из формулы Кирквуда-Мюллера (изомеры ацетона).

$$C = \frac{3eh}{2m_e^{1/2}} \frac{\alpha_a \alpha_b}{(\alpha_a / N_a)^{1/2} + (\alpha_b / N_b)^{1/2}}$$

N_a и N_b – числа электронов в валентных или внешних электронных оболочках атомов а и b; α_a и α_b – статическая поляризуемость (или атомная поляризуемость). Значения атомных поляризуемостей α рассчитаны на основании литературных данных по молекулярной рефракции (MR). Параметр сил отталкивания В рассчитывался:

$$B = \frac{1}{2} Cr_0^6$$

r_0 – равновесное расстояние, значение которого близко к сумме вандерваальсовых радиусов соответствующих атомов. Полученная атом-атомная потенциальная функция межмолекулярного взаимодействия атомов сорбата (изомеры ацетона) с атомами адсорбента дается выражением:

$$\varphi = -0,24 \cdot 10^{-51} r^{-6} + 0,72 \cdot 10^{-99} \cdot r^{-12}$$

где $C = 0,24 \cdot 10^{-51} \text{ Дж} \cdot \text{м}^6 / \text{моль}$; $B = 0,72 \cdot 10^{-99} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{12} / \text{моль}$.

Для бутилового эфира уксусной кислоты атом-атомная функция дается выражением:

$$\varphi = -4,62 \cdot 10^{-54} r^{-6} + 14,4 \cdot 10^{-114} \cdot r^{-12}$$

где $C = -4,62 \cdot 10^{-54} \text{ Дж} \cdot \text{м}^6 / \text{моль}$; $B = 14,4 \cdot 10^{-114} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{12} / \text{моль}$.

Параметр С рассчитывался согласно формулы:

$$C = -6m_e c^2 \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\chi_1 + \chi_2}$$

где χ - магнитная восприимчивость атомов.