

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОРБЦИИ *n*-АЛКАНОВ И *n*-ПЕРФТОРАЛКАНОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ПЕРФТОРГРАФИТА

**А.В. Ковыршин, Д.С. Безруков, О.В. Коханов,
Т.М. Рощина, Д.А. Шульга, Н.Ф. Степанов**

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
химический факультет. 119991, Москва, Ленинские горы д. 1, стр. 3, ГСП-1.
arseniykovyrshin@gmail.com*

Моделирование поверхностных процессов и явлений представляет большой интерес и с практической, и с теоретической точки зрения. Данная работа посвящена построению теоретической модели сорбции алканов и перфторалканов на поверхности перфторграфита и сопоставлению полученных результатов с экспериментальными газохроматографическими данными.

Ранее нами методами квантовой химии были изучены комплексы метан-перфторметан и перфторметан-перфторметан. На основании проведенных исследований было сделано заключение, что межмолекулярные взаимодействия в этих комплексах описываются в рамках теории возмущений Меллера-Плессе четвертого порядка с базисными наборами, не меньшими, чем $cc-pVQZ$. На основании расчета различных конформаций этих комплексов методами математической статистики были получены параметры парных потенциалов Леннард-Джонса, описывающих ван-дер-ваальсовое взаимодействие в комплексах.

Методами молекулярно-динамического моделирования были изучены процессы сорбции низших членов гомологического ряда *n*-алканов и *n*-перфторалканов (число атомов углерода 2 - 6) на подложке перфторграфита, которая моделировалась супермолекулой $C_{144}F_{144}H_{30}$, в температурном интервале 275-350 К. Были рассчитаны изменения свободной энергии Гельмгольца для процесса адсорбции, а также изменение энтропии и внутренней энергии в результате сорбции молекулы на поверхность. Моделирование проводилось как с использованием рассчитанных параметров для описания межмолекулярного взаимодействия, так и с помощью потенциалов обобщенного поля AMBER(GAFF).

В результате были получены величины ΔU_0 сорбции молекул *n*-алканов и *n*-перфторалканов. Из этих данных следует, что при увеличении на одну гомологическую единицу внутренняя энергия меняется на 1,85 ккал/моль для *n*-перфторалканов и на 0,98 ккал/моль для *n*-алканов. Соотношение рассчитанных величин теплот сорбции согласуется с экспериментально наблюдаемым на фторуглеродах снижением сорбции насыщенных углеводородов по сравнению с их фторированными аналогами.