

устанавливается раньше, чем на ОНПС_{С5} и ОНПС_{дшдф}. Кинетические параметры также, как и ПУР, зависят от природы взаимодействующей системы ОНПС–углеводород (табл. 1, 2).

Характерным для поверхности ОНПС является то, что k_d на внешней и внутренней поверхностях на 1-2 порядка превышают k_a . А на внутренней поверхности ОНПС k_a и k_d равновесных процессов выше тех же параметров, чем на внешней поверхности. Очевидно, это явление связано с капиллярной конденсацией углеводородов в порах, что подтверждается резким уменьшением обеих констант скорости на внутренней поверхности после малаинизации ОНПС_{сиф}.

Список литературы

1. Бондалетов В. Г., Бондалетова Л. И., Троян А. А./Иzv. высших учебных заведений. Химия и химическая технология. 2003. Т. 46. Вып. 2. С. 43-45.
2. Дмитриева З. Т., Бондалетов В. Г., Антонов И. Г., Чернов Е. Б./Журнал прикладной химии. 2002. Т. 75. Вып. 12. С. 1988-1992.

Изменение конформации элементарных фрагментов текстуры молекулярно-ситового углеродного волокна при обработке $AlCl_3$

*Н.В.Трушкин, *А.Бервено, Т.Шарпенкова,
Л.В.Брюховецкая, В.П.Бервено*

*Кемеровский филиал Института химии твердого тела и механохимии СО РАН
650099, Россия, г.Кемерово, пр. Советский 18,
E-mail: carbnanof@kemnet.ru*

**Городской классический лицей, г.Кемерово, ул. Мичурина 19*

Введение

Углеродное волокно (УВ) — давно известный материал и, в то же время, это материал будущего. Получают УВ из целлюлозы, из полиакрилонитрила, из каменноугольного, нефтяного пеков.

Основное количество УВ получают из каменноугольного, нефтяного пеков.

Производства УВ из пека в России нет. В Кемеровском филиале Института химии твердого тела и механохимии разрабатывают методы получения углеродного волокна из каменноугольного пека для выделения гелия из природного газа, водорода из генераторного газа (из смеси с окисью углерода).

Цель работы — выбор реагента для модификации (уменьшения от 0,28 до 0,2 нм.) входных окон в поры молекулярно-ситового углеродного волокна (МС УВ) для выделения гелия

из смеси с метаном — из природного газа — по данным моделирования изменений формы элементарных фрагментов текстуры МС УВ.

Методика

Работа выполнена с использованием программы «СHEMOFFICE», включающую в себя программу создания молекул «СHEMDRAW» и программы минимизации энергии молекул, их ассоциатов. В процессе минимизации энергии с помощью программы «МОРАС» выбирается оптимальная конформация ассоциата.

Эксперимент. Волокнообразующий пек получают из каменноугольного пека. Из расплава пека формируют пековое волокно. Затем пековое волокно переводят в неплавкое состояние окислением (стабилизацией) кислородом воздуха. После этого волокно карбонизируют в токе азота при нагреве от 300 ° до 500–800 °С. Волокно для сорбционных целей активируют в водяном паре или в углекислом газе при нагреве до 500-900 °. В активированном УВ размер пор — около 0,28 нм. С помощью УВ с таким размером пор разделяют воздух на азот и кислород. Для эффективного разделения газов с иными размерами молекул необходимы соответствующие поры. Требуется выяснить, как изменится размер входов в них с помощью прививки функциональных групп к боковым атомам углерода в графене (рис.1). Прививку выбранной функциональной группы в процессе синтеза МС УВ возможно смоделировать с помощью «СHEMOFFICE».

При анализе структуры МС УВ по данным дифракции рентгеновских лучей выявлено, что она состоит в основном из трехслойных ассоциатов чешуек (графенов) (рис. 1). Размеры чешуйки в зависимости от условий получения МС УВ составляют от 0,5 до 50 наномеров.

Поры — полости в УВ — образуются между двумя чешуйками — полиядерными молекулами (например, коронена), между которыми стоит меньшая третья — трёх-четырёх кольчатая молекула (см. рис. 1).

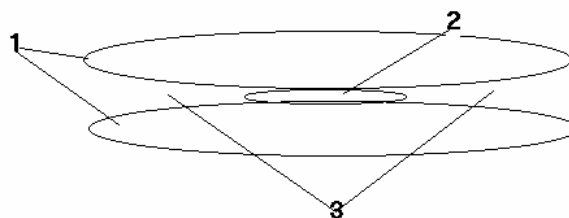


Рис 1.Схема структурного фрагмента УВ с полостью: 1- внешние графеновые слои; 2 — внутренний слой; 3 — пространство между слоями — адсорбционный объем — поры

В процессе окисления УВ кислородом — при термоокислительной стабилизации пекового волокна при температуре около 320 °С — средний слой

ассоциата частично выгорает (рис. 1). Щель между оставшимися графенами с недогоревшей распоркой и является молекулярной порой.

Трехслойный ассоциат — из трёх короненов — модель элементарного структурного фрагмента волокнообразующего пека и исходного пекового волокна — представлен на рисунке 2.

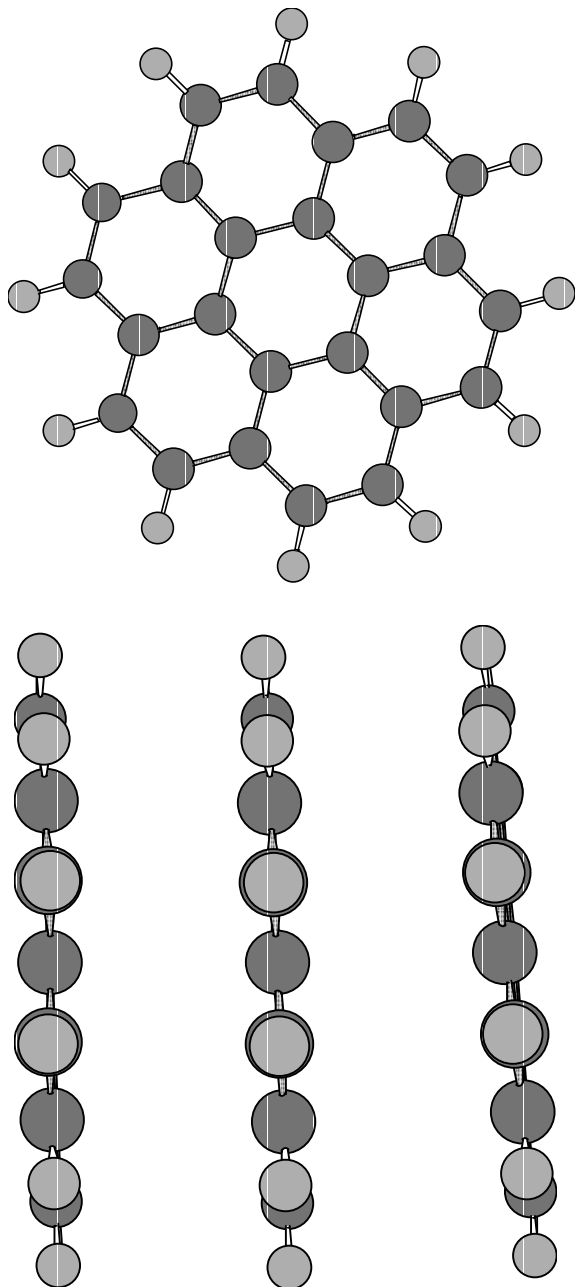


Рис. 2. Модель структурной единицы пека, пекового волокна

При термоокислительной стабилизации ассоциаты пекового волокна сшиваются кислородными мостиками в трёхмерную матрицу. При этом пековое волокно теряет способность плавиться. Далее волокно нагревают до 500-800 °С в парах воды. При этой температуре оставшиеся кислородсодержащие функциональные группы разрушаются и их оскол-

ки улетают. Ассоциаты, начиная с 450-500 °С, сшиваются углерод-углеродными связями в трёхмерную углеродную матрицу. Элементарные структурные фрагменты объединяются в блоки — в зависимости от температуры — от 0.5 нм. (500 °С), 1 нм. (600 °С) до 50 и более нанометров при 800 °С. Размер щелей при этом почти не меняется — около 0.3 нм.

При низкотемпературном окислении УВ на краях графенов образуются гидроксилы (рис.4). Для уменьшения входного размера щели на края графенов необходимо присоединить объёмные функциональные группы.

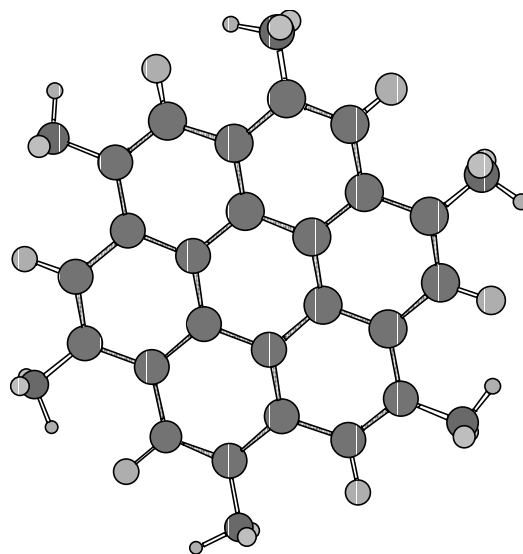


Рис.4. Окисленный коронен

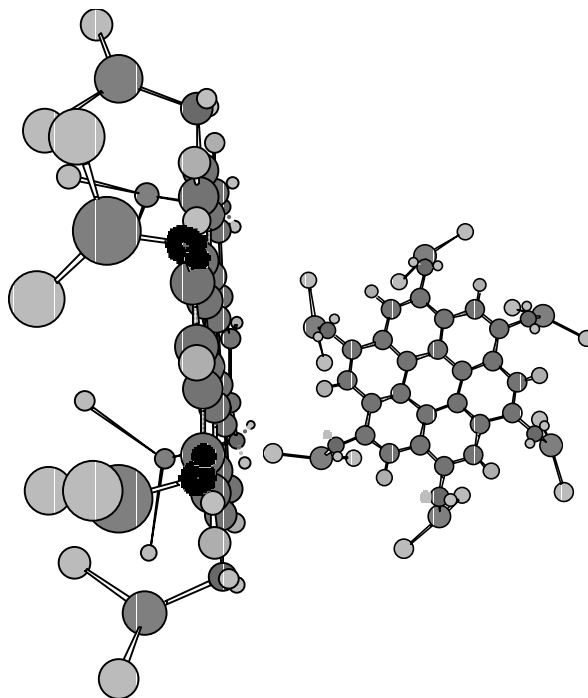


Рис.5 Шестизамещённый (-O-Al<Cl₂)₆-коронен

Водород гидроксидов при взаимодействии с трёххлористым алюминием в газовой фазе может заместиться на $-AlCl_2$ (рис.5). Водород с хлором — удаляются в виде соляной кислоты. Такие концевые группы ориентированы под углом к плоскости коронена. Вероятно, они могут быть удобными модификаторами — ограничителями входных окон в поры молекулярно-ситового волокна.

Выводы

1. В ходе работы были рассмотрены формы структурных фрагментов трёх типов молекулярно-ситовых УВ — безкислородного, окисленного и модифицированного $AlCl_3$.
2. $AlCl_3$ может рассматриваться как приемлемый модификатор для уменьшения размеров входных окон в поры УВ.

Исследование возможности определения металлов подгруппы цинка и свинца с помощью сульфарсазена и 4-(2-пиридилазо)-резорцина

Л.В. Трубачева, С.П. Чернова, А.В. Трубачев

*Удмуртский государственный университет,
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1,
E-mail: chsp@uni.udm.ru*

В современной аналитической химии азореагенты пользуются большой популярностью из-за способности этих веществ образовывать интенсивно окрашенные комплексы с большим числом ионов металлов. Это дает возможность разрабатывать с их применением чувствительные методики спектрофотометрического определения элементов.

Элементы подгруппы цинка и свинец являются биологически активными. Ртуть, кадмий, свинец относятся к сильным токсичным неорганическим загрязнителям техногенного происхождения. Поэтому и в настоящее время разработка простых высокочувствительных методик определения данных металлов остается актуальной проблемой.

Для того чтобы эффективнее проводить аналитическое определение, необходимо знать условия комплексообразования с органическими реагентами: состав образующихся комплексов, константы устойчивости комплексных соединений, а также области pH их существования.

В данном исследовании можно выделить три этапа:

1. Изучение процессов комплексообразования;

2. Разработка алгоритма фотометрического определения содержания ионов металлов подгруппы цинка и свинца в водных растворах;
3. Разработка алгоритма титриметрического определения в присутствии металлохромных индикаторов.

Спектрофотометрическим методом был установлен мольный и протонный состав комплексов Hg(II), Zn(II), Cd(II) и Pb(II) с сульфарсазеном (SAA) и 4-(2-пиридилазо) — резорцином (ПАР). Определены области pH образования и существования комплексов, рассчитаны константы устойчивости.

Полученные результаты позволили предложить алгоритмы спектрофотометрического определения методами градуировочного графика и комплексонометрического титрования с визуальной и фотометрической индикацией конечной точки титрования.

К преимуществам метода градуировочного графика можно отнести низкий предел обнаружения определяемых металлов, избирательность, широкий интервал определяемых концентраций. В тоже время метод комплексонометрического титрования характеризуется простотой выполнения, высокой скоростью проведения анализа.

Предлагаемые алгоритмы могут быть использованы для создания методик определения цинка, кадмия, ртути и свинца в водных объектах окружающей среды.

Возможности определения цефазолина в различных объектах

В. А. Федорчук, Л. С. Анисимова, Г. Б. Слепченко

*Томский политехнический университет
634050, Томск, пр. Ленина, 30, ТПУ, ХТФ, НИЛ
микропримесей
E-mail: microlab@tpu.ru*

Цефазолин принадлежит к полусинтетическим аналогам β -лактамных антибиотиков. Одной из причин его широкого распространения является высокая эффективность при лечении инфекций дыхательных путей и ряде других заболеваний наряду с низкой токсичностью.

По химическому строению цефазолин является производным 7-аминоцефалоспоровой кислоты, структурная формула антибиотика представлена на рисунке 1. Выпускается в виде натриевой соли.