

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ КОНТРОЛЬ КАЧЕСТВА БЕНЗИНА НА СОДЕРЖАНИЕ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ

Герасимчук А.С., Катаева Н.Н., Раскатова Е.А.

Нижнетагильская государственная социально-педагогическая академия

В последнее время много внимания стало уделяться качеству автомобильного бензина, поскольку от его состава зависит состояние двигателя автомобиля. Детонационная стойкость – важнейший показатель качества бензина. Она характеризует способность автомобильных бензинов противостоять самовоспламенению при сжатии, обеспечивает нормальное сгорание топлив на всех режимах эксплуатации двигателя. Высокая детонационная стойкость бензина достигается использованием в качестве его компонентов высокооктановых вторичных продуктов переработки нефти и (или) антидетонаторов. Самым эффективным антидетонатором является тетраэтилсвинец (ТЭС) – $Pb(C_2H_5)_4$, который представляет собой тяжелую маслянистую, бесцветную и сильно ядовитую жидкость. В качестве антидетонатора ТЭС используется с 1921 года, однако более дешевого и столь же эффективного аналога пока не создано. Кроме тетраэтилсвинца в качестве антидетонаторов добавляют тетраметилсвинец, допущены и используются органические соединения марганца и железа. Марганец в качестве октаноповышающей добавки используется либо в виде цикlopентадиенилтрикарбонилмарганца (ЦТМ), либо в виде метилциклопентадиенилтрикарбонилмарганца (МЦТМ).

Существуют бензины с разным октановым числом и к ним предъявляются следующие нормы и требования, представленные в таблице.

Таблица. Характеристики автомобильных бензинов (ГОСТ 2084–77)

	А-72	А-76 неэтил.	А-76 этил.	АИ-91	АИ-93	АИ-95
Массовое содержание свинца, г/дм ³	0,013	0,013	0,17	0,013	0,013	0,013
Содержание марганца, мг/дм ³	-	50	-	-	-	-
Концентрация железа, г/дм ³	-	0,037	-	-	-	0,037

Содержание металлов в бензине можно контролировать методом инверсионной вольтамперометрии. Это метод электрохимического анализа, в котором для снижения нижней границы определяемых концентраций используется предварительное концентрирование анализируемо-

го компонента на рабочем электроде (толсто пленочный модифицированный графитовый электрод) с помощью различных электрохимических или химических реакций, в том числе и за счет адсорбции, с последующей регистрацией вольтамперограммы концентрата.

КВАНТОВО – ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ pK_{OH} ПХС И ЭНЕРГИИ ДЕПРОТОНИРОВАНИЯ ГИДРОКСОГРУППЫ

Грибанов Е.Н., Головина А.А., Оскотская Э.Р.

Орловский государственный университет

Исследование кислотно – основных свойств сорбентов с о, о'- диокси – азо – функциональной аналитической группировкой (ФАГ) представляет значительный интерес, в виду того что $pK_{ион}$ и закономерности изменения кислотности в рядах этих соединений крайне важны для прогнозирования их реакционной способности и их потенциала как сорбиционных агентов.

Задачей настоящей работы явился расчет энергии отрыва протона от гидроксогруппы находящейся в пара – положении к введенному заместителю для ряда сорбентов с о,о' - диокси – азо – ФАГ (схема 1) и выявление корреляционной зависимости $pK_{ион}$ от этой величины.

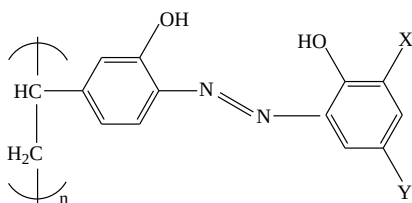


Схема 1

где X и Y – различные заместители.

№ сорбента	1	2	3	4	5	6	7	8	9
X	H	H	H	H	SO ₃ H	SO ₃ H	SO ₃ H	NO 2	COO H
Y	H	C l	SO ₃ H	NO 2	Cl	SO ₃ H	NO ₂	NO 2	SO ₃ H

Расчеты модельных сорбентов проведены при помощи одного из квантово – химических методов *ab initio* с базисным набором орбиталей 3-21G без учета сольватационной сферы. Значения полных энергий молекул и соответствующих им анионов рассчитаны методом RHF/3-21G с