

тенциальной функции парного межмолекулярного взаимодействия в форме Бакингема-Корнера. При молекулярно-статистическом расчете ГХА в условиях равновесной адсорбции параметры ААП для sp^3 -гибридизованного атома С были модифицированы путем введения поправки δ , рассчитанной с использованием константы спин-спинового взаимодействия ($^1J_{C,H}$) [1]. В связи с тем, что не для всех рассмотренных в работе соединений известны данные по геометрии в газовой фазе, необходимые в молекулярно-статистических расчетах геометрические параметры были определены с помощью пакета программ Gamess v.6.0 в рамках метода ab initio RHF/6-31G**.

По полученным в работе данным по теплоте и энтропии адсорбции нами были сопоставлены энтальпийный и энтропийный вклады в общую энергию межмолекулярного взаимодействия молекулы с адсорбентом, пропорциональную свободной энергии Гиббса процесса адсорбции при средней температуре исследованного в работе интервала. Было установлено, что для большинства рассмотренных в работе соединений энтальпийный (энергетический) вклад оказывается меньше энтропийного, что, по всей видимости, обусловлено неплоским строением молекул изученных соединений и сохранением ими при адсорбции вращательных и колебательных степеней свободы относительно плоской поверхности. Следует также отметить, что для цис-бицикло[4.1.0]гептана, цис-бицикло[4.2.0]октана энтальпийный вклад имеет большее значение, что связано с особенностями геометрического строения и существования предпочтительной ориентации молекулы относительно поверхности ГТС в адсорбированном состоянии.

Изучение соотношения энтальпийного и энтропийного вкладов в энергию адсорбции позволяет определить подвижность молекулы в поле адсорбционных сил. Полученные данные позволяют предсказать порядок элюирования рассмотренных соединений на колонках с ГТС в условиях равновесной газо-адсорбционной хроматографии.

1. Яшкин С.Н., Светлов Д.А., Кузьменко И.А. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2005, Т.48, №10, С.139-145.

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ЦИНКА, КАДМИЯ И СВИНЦА С КОМПЛЕКСОНАМИ, ПРОИЗВОДНЫМИ ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ.

Лемза К.В., Никольский В.М.

Тверской государственный университет

Катионы 3d- элементов обладают хорошими комплексообразующими свойствами и высокой биологической активностью.

В данной работе представлены результаты изучения комплексообразования этилендиамин-N,N'-бис(оксиэтил)-N,N'-диянтарной кислоты (БОЭДДЯК) с ионами двухвалентных металлов (M^{2+}): кадмия, цинка и свинца.

Для определения констант устойчивости средних комплексов ML^2 нами был использован метод Бьеррума, основанный на вычислении функции образования по результатам рН-метрического титрования смеси растворов $M(NO_3)_2$ и Na_4L , взятых в молярном соотношении 1:3 соответственно [1]. Титрование проводилось при ионной силе раствора 0,1 (KNO_3) и при температуре $25 \pm 0,5^\circ C$; рН раствора измеряли при помощи иономера рН-410. Функцию образования вычислили по формуле:

$$\bar{n} = \frac{C_l - \alpha_H [L^{4-}]}{C_m}$$

Равновесную концентрацию лиганда L^{4-} вычисляют по формуле:

$$[L^{4-}] = \frac{C_L (4 - \alpha) - [H^+]}{\beta_n}$$

Рассчитанные константы устойчивости средних комплексов цинка, кадмия и свинца с БОЭДДЯК приведены в таблице. Для сравнения в этой же таблице представлены аналогичные константы устойчивости комплексов этих же металлов с этилендиамин- N,N'-диянтарной кислотой (ЭДДЯК), полученные Гореловым И. П. [1].

Комплексон	Zn ²⁺	Cd ²⁺	Pb ²⁺
БОЭДДЯК	12,40±0,04	11,31±0,08	8,34±0,20
ЭДДЯК	13,21	11,40	8,76

1. Горелов И. П. Диссертация ... доктора химических наук.- Калинин, 1979, с. 312

ТВЕРДОТЕЛЬНЫЙ ГАЗОВЫЙ СЕНСОР НА АММИАК

Лившиц Е.С., Тимурзиева Р.Д.

Тверской государственный университет

Контроль содержания аммиака в различных газовых средах имеет важное значение. Обычно содержание аммиака определяют химическим способом, например, с помощью кислотно-основного титрования с предварительным поглощением аммиака специальным раствором. Этот