

обменных процессах в организме человека и животных. Функциональными мономерами являлись метакриловая кислота (МАК) и винилпирролидон (ВП), а сшивающими реагентами – триметилпропантриметакрилат (ТРИМ), ди- (ДЭГДМА) и триэтиленгликольдиметакрилат (ТЭГДМА). Синтез ПМО осуществлен радикальной полимеризацией в присутствии азодиизобутиронитрила. Изучение сорбционных свойств ПМО в этаноле и воде проведено в статических условиях. Концентрация никотиновой кислоты определена спектрофотометрически.

Изучение влияния функциональных мономеров и сшивающих агентов при различных их молярных соотношениях в сополимеризации на сорбционную способность ПМО показало, что МАК, в отличие от ВП, придает полимеру большую сорбционную способность в случае использования ДЭГДМА в качестве сшивающего реагента. Более низкую сорбционную способность проявляют образцы, полученные полимеризацией ВП и сшивающими агентами - ТРИМ и ТЭГДМА.

## ГАЗОАДСОРБЦИОННАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ НЕКОТОРЫХ НИТРОПРОИЗВОДНЫХ ТИОФЕНА НА ГРАФИТИРОВАННОЙ ТЕРМИЧЕСКОЙ САЖЕ

*Мурашов Б.А., Светлов Д.А., Яшкин С.Н.*

Самарский государственный технический университет

В работе впервые исследовано хроматографическое поведение молекулы нитробензола и некоторых нитропроизводных тиофена (2-нитро-, 3-нитро-, 2,4-динитро- и 2,5-динитро-) на колонке с графитированной термической сажой (ГТС) в условиях равновесной газоадсорбционной хроматографии (ГАХ). Из полученных термодинамических характеристик адсорбции (ТХА) (константа Генри адсорбционного равновесия, молярная дифференциальная теплота и энтропия адсорбции) следует, что адсорбция изученных моно- и ди- нитропроизводных тиофена определяется числом и положением нитрогрупп в тиофеновом кольце относительно гетероатома. Так в ряду мононитротииофенов 2-нитротииофен удерживается слабее 3-нитротииофена, а 2,5-динитротииофен слабее 2,4-динитротииофена. Такой порядок элюирования рассмотренных соединений на ГТС можно объяснить неплоским строением молекул содержащих нитрогруппу во 2 и 5 положении гетероцикла, поскольку имеющая значительный ван-дер-Ваальсовый радиус нитрогруппа будет выходить из плоскости тиофенового кольца за счет возникающего между атомом S и нитрогруппой взаимного отталкивания (*орто*-эффект), что приводит к уменьшению площади контакта молекулы с плоской поверхностью адсорбента и, как следствие, уменьшению

энергии адсорбции исследованных сорбатов на ГТС. Кроме этого необходимо отметить, что вклад в адсорбцию на ГТС тиофенового кольца меньше чем бензольного, т.к. нитробензол элюируется между моно- и динитротиофенами. Последнее можно объяснить различиями в размерах тиофенового и бензольного колец.

В литературе отсутствуют данные по значениям параметров атом-атомных потенциальных функций (ААП) парного межмолекулярного взаимодействия атомов N и O нитрогруппы с базисной гранью графита. В связи с этим, для проведения молекулярно-статистических расчетов ТХА нитротиофенов на ГТС в рамках полуэмпирической молекулярно-статистической теории адсорбции (ПМСТА) на основании экспериментально полученных ТХА молекулы нитробензола и данных о ее геометрическом строении (методы газовой электронографии и микроволновой спектроскопии) впервые определены параметры потенциала Бакингема-Корнера парного взаимодействия А(адсорбат)...С(ГТС)  $C_1$ ,  $C_2$ , В и q ААП атомов N и O нитрогруппы. Используя полученные параметры ААП атомов N и O нитрогруппы, был произведен расчет ТХА нитротиофенов на ГТС, который показал, что теоретически рассчитанные ТХА согласуются с экспериментальными если: 1) учтено неплоское строение молекул тиофенов, содержащих нитрогруппу во 2 и 5 положениях гетероцикла и 2) сделана поправка в параметры ААП на взаимное влияние структурных фрагментов в молекуле. Предпринята попытка определения геометрических параметров изученных нитротиофенов в газовой фазе, которые хорошо согласуются с данными альтернативных квантово-химических расчетов.

## ПРИМЕНЕНИЕ СОРБЦИОННО-СТРУКТУРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ И МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ В ГАЗОХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ МОЛЕКУЛ ПРЕДЕЛЬНЫХ КАРБОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

*Новоселова О.В., Кузьменко И.А., Яшкин С.Н.*

Самарский государственный технический университет

Сорбционно-структурные корреляции широко используются в газовой хроматографии при изучении молекулярных механизмов разделения соединений, их нестандартной идентификации в сложных смесях, а также установлении взаимосвязи между различными физико-химическими характеристиками сорбатов.

В рамках полуэмпирической молекулярно-статистической теории адсорбции на основании геометрии в газовой фазе и применением различного набора атом-атомных потенциальных функций взаимодействия