

ОЧИСТКА СПИРТСОДЕРЖАЩИХ ЖИДКОСТЕЙ ОТ ИЗОАМИЛОВОГО СПИРТА

И.А. Какорин, студент
Волгоградский государственный университет
(Россия, г. Волгоград)

DOI: 10.24412/2500-1000-2023-4-4-200-203

Аннотация. В данной статье представлен обзор процесса очистки спиртосодержащих жидкостей от изоамилового спирта. Изложены несколько методов, которые можно использовать для удаления изоамилового спирта из спиртосодержащих жидкостей, включая дистилляцию, хроматографию и экстракцию. Более детально рассмотрен механизм выявления изоамилового спирта с помощью пористого материала- пиролизованного полиакрилонитрила.

Ключевые слова: сенсор, пиролизированный полиакрилонитрил, изоамиловый спирт, метод MNDO, очистка.

Спиртосодержащие жидкости распространены во многих отраслях промышленности, включая фармацевтику, косметику, производство продуктов питания и напитков. Эти жидкости могут содержать различные спирты, в том числе изоамиловый спирт. Однако изоамиловый спирт может оказывать негативное влияние на вкус, запах и общее качество конечного продукта. Поэтому очистка спиртосодержащих жидкостей от изоамилового спирта является важным процессом, позволяющим повысить качество конечного продукта. Изоамиловый спирт $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ – основной компонент сивушного масла, из которого его и получают. Изоамиловый спирт представляет собой бесцветную жидкость с резким запахом, мало растворимую в воде, эта жидкость ядовита и её пары раздражают слизистые оболочки дыхательных путей и вызывают удушье и кашель.

Существует несколько способов очистки спиртосодержащих жидкостей от изоамилового спирта [1-2]. Одним из наиболее часто используемых методов является дистилляция. Дистилляция заключается в нагревании спиртосодержащей жидкости до точки кипения, при которой она испаряется, а затем конденсируется в отдельной емкости. Поскольку изоамиловый спирт имеет более низкую температуру кипения, чем другие спирты, его можно

отделить от других спиртов в смеси с помощью этого метода.

Другим методом очистки спиртосодержащих жидкостей от изоамилового спирта является хроматография. Хроматография – разделение различных компонентов смеси на основе их химических свойств. В этом случае спиртосодержащую жидкость пропускают через хроматографическую колонку, где изоамиловый спирт отделяют от других спиртов на основании его химических свойств.

Третьим методом очистки спиртосодержащих жидкостей от изоамилового спирта является экстракция. Экстракция – удаление определенного компонента из смеси с использованием растворителя, который может селективно растворять этот компонент. В этом случае спиртосодержащая жидкость смешивается с растворителем, способным селективно растворять изоамиловый спирт, позволяя удалить его из смеси.

Теперь рассмотрим очистку жидкости от изоамилового спирта с помощью пористой структуры пиролизованного полиакрилонитрила (ППАН) [3-5]. Было рассмотрено три положения молекулы изоамилового спирта над поверхностью полимера:

1) молекула изоамилового спирта располагалась над центром вакансии группой OH;

2) молекула изоамилового спирта располагалась над центром вакансии группой

СН₃;

3) молекула изоамилового спирта располагалась над слоем полимера группой

СН₃, но при этом углеродная цепочка была параллельно поверхности ППАН (рис. 1).

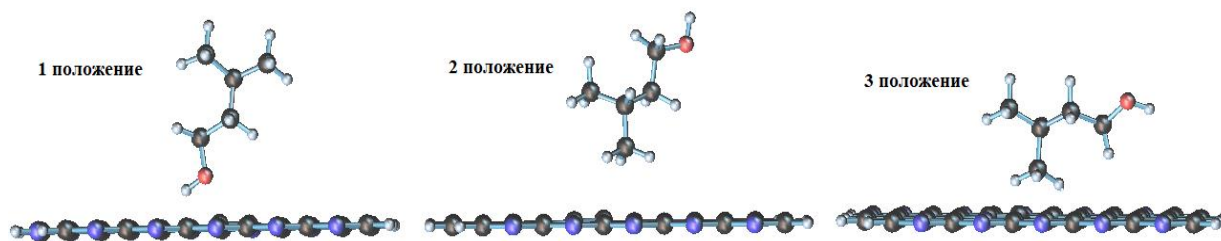


Рис. 1. Расположение молекулы изоамилового спирта над монослоем ППАН

Молекула изоамилового спирта приближалась к фиктивному атому, расположенному в центре поры полимера. Процесс адсорбции моделировался поэтапным приближением адсорбирующейся молекулы с шагом 0,1 Å к выбранной точке. Геометрические параметры системы оптими-

зировались на каждом шаге. С помощью проведенных расчетов были построены профили поверхности потенциальной энергии процессов адсорбции для изоамилового спирта в различных положениях (рис. 2).

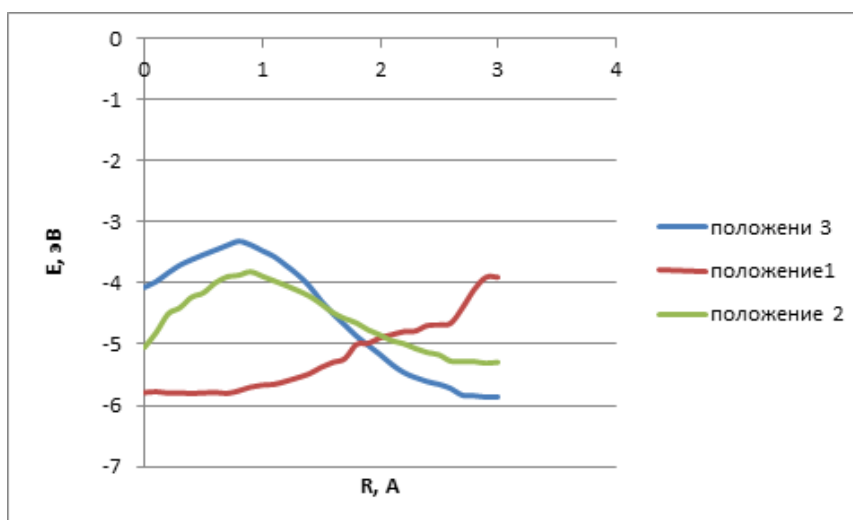


Рис. 2. Энергии взаимодействия молекулы изоамилового спирта с ППАН

Изучение энергетических кривых показало, что молекула изоамилового спирта адсорбируется на поверхности слоя полимера, что обосновывается наличием минимума на энергетических кривых, иллюстрирующего факт образования химической связи между атомом молекулы и атомом ППАН.

Выполненные расчеты установили, что процесс адсорбции зависит от ориентации молекулы спирта относительно слоя. Так при ориентации молекулы изоамилового спирта функциональной группой ОН происходит отрыв атома водорода от атома кислорода. Атом водорода проходит через

пору монослоя и адсорбируется на атом углерода. Оставшаяся часть молекулы спирта адсорбируется на полимере, происходит образование химической связи между атомом кислорода адсорбирующейся молекулы атомом углерода ППАН, энергия адсорбции составляет 5,8 эВ. Следует отметить, что приближение молекула спирта к полимеру происходит безбарьерно (рис. 3).

Как видно на графике при расположении молекулы изоамилового спирта в положении 2 присутствует энергетический барьер, величиной 1,53 эВ. Анализ результатов геометрии позволил установить, что

приближение адсорбирующейся молекулы к слою полимера приводит к ее разрушению, атомы водорода отрываются от атома углерода и адсорбируются на слое ППАН, атом углерода молекулы изоамилового спирта встраивается в структуру слоя и образует химическую связь с атомами полимера, энергия связи составляет 5,1 эВ. Длина связи С-С равна 1,45 Å. (рис. 3).

Анализ оптимизации геометрии в положении 3 показал: молекула спирта при-

ближается на расстояние 1,2 Å к слою полимера, затем три атома водорода отрываются от атома углерода и адсорбируются на монослой, при этом атом углерода молекулы открывается от основного углеродного скелета молекулы изоамилового спирта и встраивается в матрицу ППАН. Остальная часть молекулы находится над поверхностью полимера, энергия адсорбции при этом равна 4 эВ (рис. 3).

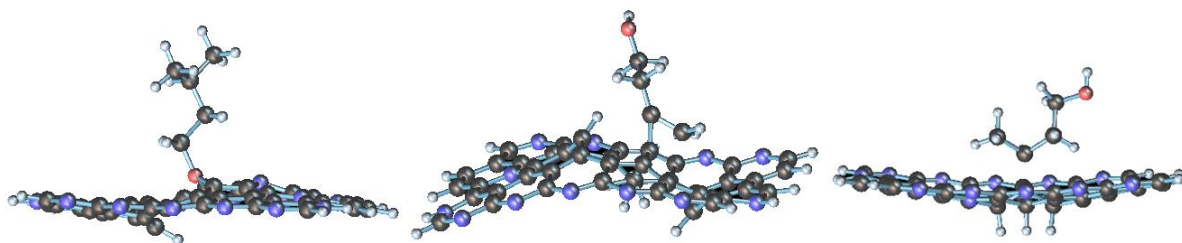


Рис. 3. Адсорбция изоамилового спирта на ППАН в различных положениях

Выполненные расчеты показали, что молекула изоамилового спирта адсорбируется на поверхности полимера в любых положениях, таким образом при прохождении жидкости через фильтр с ППАН будет происходить очистка от данной примеси. После удаления изоамилового спирта

из спиртосодержащей жидкости очищенную жидкость можно использовать для различных целей. Таким образом, очистка спиртосодержащих жидкостей от изоамилового спирта является важным процессом, позволяющим повысить качество конечного продукта.

Библиографический список

1. Сиюхов, Х. Р. Научное обоснование и разработка инновационной технологии глубокой очистки пищевого спирта от сивушных масел: специальность 05.18.01 «Технология обработки, хранения и переработки злаковых, бобовых культур, крупяных продуктов, плодоовощной продукции и виноградарства»: автореферат диссертации на соискание ученой степени д.т.н. / Сиюхов Хазрет Русланович. – Краснодар, 2011. – 48 с.
2. Султанов, Ю. М. Влияние количества и состава сивушных масел на органолептические свойства коньяка / Ю. М. Султанов, Г. А. Рабаданов, С. З. Саидалиева // Повышение качества и безопасности пищевых продуктов: Материалы VIII Всероссийской научно-практической конференции, Махачкала, 23-24 октября 2018 года. – Махачкала: Дагестанский государственный технический университет, 2018.
3. Давлетова, О. А. Структура и электронные характеристики пиролизованного полиакрилонитрила: специальность 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах»: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Давлетова Олеся Александровна. – Волгоград, 2010. – 140 с.
4. On the mechanism of pore formation in pyrolyzed polyacrylonitrile / O. A. Kakorina, I. V. Zaporotskova, L. V. Kozhitov, A. V. Popkova // Journal of Physics: Conference Series, Saint Petersburg, 14-16 мая 2019 года. Vol. 1281. – Saint Petersburg: Institute of Physics Publishing, 2019. – P. 012031. – DOI 10.1088/1742-6596/1281/1/012031.
5. Theoretical studies of the structure of the metal-carbon composites on the base of acrylonitrile nanopolymer / I. V. Zaporotskova, L. V. Kojitov, O. A. Davletova [et al.] // . – 2014. – Vol. 6, № 3. – P. 03035.

CLEANING ALCOHOL-CONTAINING LIQUIDS FROM ISOAMYL ALCOHOL

I.A. Kakorin, *Student*
Volgograd State University
(Russia, Volgograd)

Abstract. *This article provides an overview of the process of purification of alcohol-containing liquids from isoamyl alcohol. Several methods that can be used to remove isoamyl alcohol from alcohol-containing liquids, including distillation, chromatography, and extraction, are outlined. The mechanism of detection of isoamyl alcohol using a porous material, pyrolyzed polyacrylonitrile, is considered.*

Keywords: *sensor, pyrolyzed polyacrylonitrile, isoamyl alcohol, MNDO method, cleaning.*