

ТЕХНОЛОГИИ ВЫЯВЛЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАНОСТРУКТУР

И.А. Какорин, студент

Волгоградский государственный университет
(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2023-6-4-111-114

Аннотация. В работе предложен способ выявления фурфурола в спиртосодержащих жидкостях. Адсорбция примеси на пористом пиролизованном полиакрилонитриле изменяет его проводящие свойства, фиксируя это изменение можно определить примесь в составе исследуемой жидкости. Также в работе подробно описана методика теоретических расчетов.

Ключевые слова: пиролизованный полиакрилонитрил, фурфурол, уравнением Шредингера, адсорбция, примесь.

Фурфурол – это альдегид с формулой $C_5H_4O_2$. Очень ядовитое соединение. По токсичности превосходит этиловый алкоголь в 80 раз. Оказывает раздражающее действие при контакте с кожей и со слизистыми оболочками. Действие на ЦНС проявляется судорогами и параличами. Присутствует в низкокачественном самогоне и в прочих суррогатах алкоголя. В изготовленных в заводских условиях алкогольных напитках фурфурола быть вообще не должно. Поэтому необходимо выявлять данную примесь [1]. В работе рассмотрено взаимодействие фурфурола с пористым пиролизованным полиакрилонитрилом [2-3]. Результаты выполнены с помощью квантово-химических расчетов.

Описание методики расчета. Любое твердое тело состоит из атомов, т.е. представляет собой совокупность ядер и электронов. В кристаллических твердых телах ядра атомов располагаются в узлах кристаллической решетки, обладающей пространственной периодичностью. В аморфных телах расположение ядер более или менее случайно. Стационарное состояние всех частиц описывается уравнением Шредингера:

$\hat{H}\Psi = E\Psi$, где \hat{H} – гамильтониан всей совокупности частиц, т.е. гамильтониан твердого тела; Ψ – собственная волновая функция; E – энергия твердого тела.

Гамильтониан системы частиц: $\hat{H} = \hat{K} + U$, где \hat{K} – оператор кинетиче-

ской энергии этой системы; U – ее потенциальная энергия.

Однако из-за огромного числа независимых переменных уравнение Шредингера в настоящее время не может быть решено в общем виде. Для отыскания приближенного решения прибегают к ряду упрощающих предположений: адиабатического приближения или приближения Борна-Оппенгеймера; валентная аппроксимация; одноэлектронное приближение.

Это эффективное поле характеризует действие всех остальных электронов на i -й электрон. Тогда уравнение Шредингера имеет вид:

$$\left\{ \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \tilde{U}_i(r_i) + U_i(r_i) \right] \right\} \Psi_e = E_e \Psi_e$$

Здесь $U_i(r_i)$ обозначена потенциальная энергия i -го электрона в поле всех ядер; $\tilde{U}_i(r_i)$ – потенциал, описывающий взаимодействие i -го электрона с остальными электронами; $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i$ – кинетическая энергия i -го электрона [4].

Для проведения теоретических расчетов взаимодействия ПШАН с альдегидом необходимо построить и выбрать оптимальную модель молекулы фурфурола. Выполненные расчеты определили расстояния между атомами С-С равно 1,45 Å,

атомами С-О 1,35 Å, а между С-Н расстояние стало равным 1.1 Å.

Первоначально необходимо убедиться, что определение примесей в водно-этанольной смеси (спиртосодержащей жидкости) с помощью пористых наноструктур не приведет к потере основного компонента этой смеси путем адсорбции молекул этанола на поверхности монослоя пиролизованного полиакрилонитрила (ППАН). С этой целью была теоретически исследована возможность адсорбционного взаимодействия молекулы этанола и ППАН. Процесс моделировался следующим образом: молекула этанола пошагово приближалась к центру поры, расположенной в середине кластера полимера, вдоль перпендикуляра, проведенного к фиктивному атому, который располагался

в центре поры (с шагом 0,1 Å). Было установлено отсутствия адсорбционного взаимодействия молекулы этанола и пористого полиакрилонитрила. Это весьма важный вывод, доказывающий избирательность адсорбционной активности пористого полимера: основной компонент водно-этанольной смеси не выводится в процессе сорбции, что обеспечивает сохранение основных свойств спиртосодержащего продукта.

Далее рассматривалось взаимодействие фурфурола с пористым полимером. Выбиралось две ориентации:

- 1) фурфурол приближался атомом кислорода;
- 2) фурфурол приближался двумя атомами кислорода к центру поры (рис. 1).

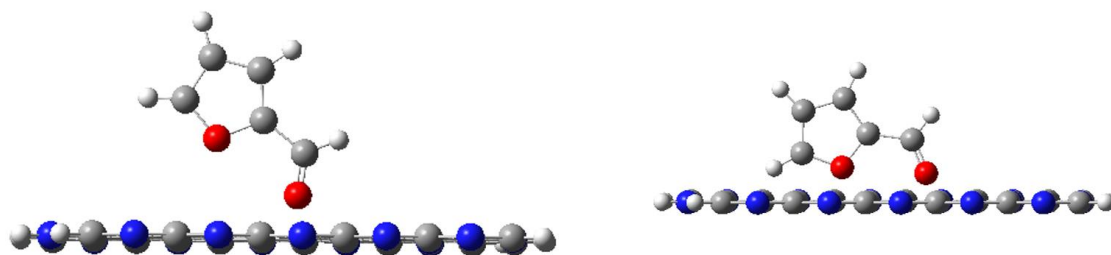


Рис. 1. Ориентации фурфурола относительно ППАН

Расчеты показали, что молекула альдегида адсорбируется на поверхности полимера. Выполненные расчеты установили, что процесс адсорбции зависит от ориентации молекулы фурфурола относительно слоя полимера. Так при ориентации молекулы фурфурола одним атомом кислорода на центр поры наблюдается следующая картина: атом кислорода, разрывает связь с атомом углерода молекулы альдегида и встраивается в структуру полимера,

оставшаяся часть фурфурола адсорбируется на поверхности полимера, образуется связь С-С, равная 1.36 Å. Анализ результатов геометрии приближения фурфурола двумя атомами кислорода к центру поры на поверхности ППАН позволил установить, что приближении адсорбирующейся молекулы к монослою приводит к его искривлению, при этом молекула альдегида адсорбируется на полимере, образуя две связи С-О и одну связь С-С (рис. 2).

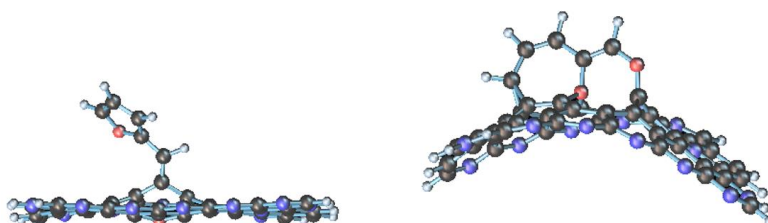


Рис. 2. Образование адсорбционных комплексов «ППАН+фурфурол»

Расчеты позволили построить одноэлектронные спектры. Обработка результатов расчетов электронного строения пористого полимера и адсорбционного ком-

плекса «ППАН+фурфурол» определила, что уровни молекулярных орбиталей объединяются в зоны (рис. 3).

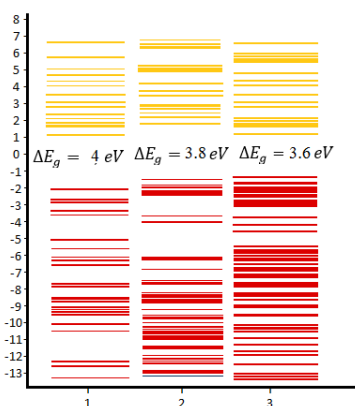


Рис. 3. Одноэлектронные энергетические спектры: 1-ППАН; 2- ППАН +фурфурол (1 расположение); 3-ППАН+фурфурол (2 расположение).

Следует заметить, что образовавшиеся адсорбционные комплексы «ППАН+альдегид» обладают различными электронно-энергетическими характеристиками по сравнению с чистой пористой структурой. Это проявляется в изменении

ширины запрещенной зоны (запрещенная зона уменьшается при адсорбции альдегидов на поверхности ППАН), что как раз и позволяет выявить примеси в спиртосодержащих жидкостях.

Библиографический список

1. Тожиев, Э.А. Изучение процесса получения фурфурола в присутствии серной кислоты из отходов / Э.А. Тожиев, Х.Х. Косимова // *Universum: технические науки*. – 2022. – № 1-3(94). – С. 27-29.
2. Какорин, И.А. очистка спиртосодержащих жидкостей от изоамилового спирта / И.А. Какорин // *Международный журнал гуманитарных и естественных наук*. – 2023. – № 4-4(79). – С. 200-203. – DOI 10.24412/2500-1000-2023-4-4-200-203.
3. Давлетова, О.А. Структура и электронные характеристики пиролизованного полиакрилонитрила: специальность 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах»: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Давлетова Олеся Александровна. – Волгоград, 2010. – 140 с.
4. Панченко, А.Н. Идентификация примесей в спиртосодержащих веществах с использованием наноструктур / А.Н. Панченко // *Международный журнал гуманитарных и естественных наук*. – 2022. – № 5-2 (68). – С. 153-156. – DOI 10.24412/2500-1000-2022-5-2-153-156.
5. Войтюк, А.А. Применение метода MNDO для исследования свойств и реакционной способности молекул // *Журнал структурной химии*. – 1988. – Т. 29, № 1. – С. 138-162.

TECHNOLOGIES FOR DETECTING IMPURITIES USING NANOSTRUCTURES

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

Abstract. *The paper proposes a method for detecting furfural in alcohol-containing liquids. The adsorption of an impurity on porous polyacrylonitrile changes its conductive properties, fixing this change, it is possible to determine the impurity in the composition of the liquid under study. The paper also describes in detail the methodology of theoretical calculations.*

Keywords: *pyrolyzed polyacrylonitrile, furfural, Schrodinger equation, adsorption, impurity.*