

В комбинированной платформе для сбора нефтенасыщенного сорбента и мусора с поверхности воды [2], для автоматического определения угла наклона платформы в схеме включения гидроцилиндров устанавливается контактный датчик. Дополнительно в точке соединения платформы с каждой из стяжек могут быть установлены два контактных датчика для этой же цели. При установке платформы в воду угол ее наклона изменяется до тех пор, пока не происходит контакт датчиков с водой – гидроцилиндры выключаются. Еще один емкостной или кондуктометрический датчик регулирования уровня нефтяных загрязнений предполагается устанавливать в нефтеприемном лотке.

В системе для автоматического улавливания и сбора, плавающих на поверхности воды нефтяных загрязнений [3], перед боном устанавливается ползавковый механический датчик. При появлении на воде перед боном пленки нефтяных загрязнений этот датчик срабатывает, а от него выдается управляющий сигнал на два реле, в результате чего включаются два электропривода, что обеспечивает закрытие щелевых зазоров бона, то есть предотвращается дальнейшее перемещение нефтяных загрязнений вниз по водотоку и приводится в движение транспортная лента для сбора нефтяных загрязнений.

Использование датчиков – несложный, недорогой, дающий результат способ автоматизации. Широкое разнообразие типов сигнализаторов уровня позволяет выбирать оптимальные решения для конкретных задач автоматизации, а также для автоматизации технологических средств защиты водных объектов от загрязнений.

Список использованных источников

1. Заявка на изобретение а20110358 ВУ, МПК E02B 15/04. Устройство для улавливания и удаления нефтепродуктов с поверхности водотоков / В. Е. Савенок, С. А. Чепелов, А. А. Шишакова. – Заявл. 23.03.11; опубл. 31.10.12 // Официальный бюл. / Нац. центр интеллектуальной собственности РБ. – 2012. – № 5. – С. 23.
2. Заявка на изобретение а20120183 ВУ, МПК E02B 15/04. Комбинированная платформа для сбора нефтенасыщенного сорбента и мусора с поверхности воды / В. Е. Савенок, С. А. Чепелов, А. А. Шишакова. – Заявл. 09.02.12; опубл. 31.08.13 // Официальный бюл. / Нац. центр интеллектуальной собственности РБ. – 2013. – № 4.
3. Заявка на изобретение а20121697 ВУ, МПК E02B 15/04. Система для автоматического улавливания и сбора, плавающих на поверхности воды нефтяных загрязнений / В. Е. Савенок, А. А. Шишакова, С. А. Чепелов. – Заявл. 05.12.12 // Приоритетная справка Нац. центра интеллектуальной собственности РБ от 13.02.13.

УДК 678.744.72

ИССЛЕДОВАНИЕ НАБУХАНИЯ ПОЛИВИНИЛОКСАЛАТА

Студ. Гораева О.Ф., студ. Яковчик Я.Г., к.х.н., доц. Соколова Т.Н.,

к.х.н., доц. Степин С.Г.

Витебский государственный технологический университет

Поливиниловый спирт (ПВС) используют для получения гидрогелей [1], для иммобилизации ферментов [2], сорбционного разделения электролитов [3], а также для получения поливинилспиртовых волокон и пленок. Недостатком ПВС является его растворимость в воде. Уменьшить растворимость ПВС можно превратив линейные макромолекулы в сетчатые структуры путем сшивок различными реагентами [1]. Степень сшивки зависит от степени набухания полимера, чем выше степень сшивки, тем ниже степень набухания. Наиболее удобными сшивающими реагентами являются дикарбоновые кислоты.

В настоящей работе осуществлена сшивка ПВС щавелевой кислотой (ЩК) и исследовано набухание сшитого полимера. Пленки ПВС получали из водных растворов высущиванием при комнатной температуре. Сшивку проводили при 130 °С в течение 10 минут. Для выбора оптимальных условий количественного взаимодействия реагентов

были использованы следующие соотношения реагирующих компонентов: ПВС 0,04М в пересчете на мономерное звено, а ЩК 0,002М (12,4 %), 0,0015М (9,7 %), 0,00125М (8,2 %), 0,001М (6,7 %) соответственно.

Образование сшивок происходит по реакции нуклеофильного замещения за счет образования сложноэфирных связей между электрофильными реакционными центрами карбоксильных групп ЩК и гидроксильными группами ПВС как нуклеофильными реагентами. Пленка с максимальным количеством щавелевой кислоты после отверждения имела на своей поверхности кристаллы ЩК, не вступившей в реакцию.

Изучение набухания проводили гравиметрическим методом. В конические колбы с притертыми пробками заливали по 100 мл дистиллированной воды. Образцы сшитых пленок взвешивали на аналитических весах с точностью до 0,0001 г, помещали в воду и определяли изменение массы набухших образцов пленок через 15, 30, 60, 120 минут соответственно, а также через 24 часа и 12 дней. Изменение массы пленок описывается экспоненциальной зависимостью, а затем кривая выходит на предельное значение набухания.

Обработку результатов исследования проводили следующим образом.

Степень набухания пленки в процентах α , определяли как отношение изменения массы пленки за определенный промежуток времени Δm к ее исходной массе до набухания m по формуле:

$$\alpha = \frac{\Delta m}{m} \times 100 \, \%.$$

Затем рассчитывали значение натурального логарифма $\ln \frac{\alpha_\infty}{\alpha_\infty - \alpha_t}$ отношения максимальной степени набухания через 24 часа α_∞ к разности $\alpha_\infty - \alpha_t$ и строили графики зависимости натурального логарифма от времени набухания. Графики имели линейную зависимость, что позволило определить константу скорости набухания (K) по тангенсу угла наклона прямой. Скорость набухания рассчитывали как произведение константы скорости набухания на разность $\alpha_\infty - \alpha_t$. Определение гель-фракции проводили длительной экстракцией пленок водой с последующей сушкой образцов до постоянной массы.

Для оценки полноты сшивки проводили титрование водных растворов, в которых выдерживали образцы при помощи 0,1N NaOH по фенолфталеину. Титрование указывает на то, что часть щавелевой кислоты не вступает в реакцию сшивки. Особенно непрочной оказалась пленка с максимальным содержанием ЩК. Полученные данные сведены в таблицу.

Таблица – Кинетические параметры набухания сшитых пленок

Щавелевая кислота		ПВС	$K \cdot 10^{-3}$	$U_{\text{набухания}}$	Гель-фракция пленки, %
%	$C_M \times 10^{-3}$				
6,68	1,00	0,04	2,96	0,1667	93,90
8,21	1,25	0,04	2,40	0,2138	89,59
9,70	1,50	0,04	2,57	0,1674	88,95
12,40	2,00	0,04	2,86	0,1719	86,72

Как видно из данных таблицы, максимальное содержание гель-фракции имеют образцы содержащие 6,68 % ЩК. С увеличением ее концентрации количество гель-фракции уменьшается. Образец, содержащий 8,21 % ЩК, имеет самую низкую константу скорости набухания, что указывает на наиболее высокую степень сшивки. Пленки с меньшим содержанием ЩК оказались прочными при набухании даже через 12 дней, и не теряли прочность после высушивания.

Список использованных источников

1. Ковалева, С. С. Особенности поведения сшитого поливинилового спирта в водных растворах низкомолекулярных электролитов / С. С. Ковалева [и др.] // Сорбционные и хроматографические процессы. – 2006. – Т. 6 – Вып. 21. – С. 198-210

2. Ямсков, И. А. Гидрофильные носители на основе поливинилового спирта для иммобилизации ферментов / И. А. Ямсков, М. В. Буданов, В. А. Даванков // Биоорг. химия. – 1979. – Т. 5. – № 11. – С. 1728-1734.
3. Груздева, А. Н. Сорбционное разделение электролитов на поперечно сшитом поливиниловом спирте / А. Н. Груздева [и др.] // Журн. физ. химии. – 2005. – Т. 79. – № 7. – С. 1325-1327.

УДК 547.244

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХОЛЕСТЕРИНОВЫХ ЭФИРОВ КАРБОРАНКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

**К.х.н., с.н.с. Дикусар Е.А., к.х.н., с.н.с. Пушкарчук А.Л.,
к.х.н., в.н.с. Зеленковский В.М., д.х.н., проф. Поткин В.И.,
к.х.н., н.с. Рудаков Д.А.**

Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси;

к.х.н., доц. Степин С.Г.

Витебский государственный технологический университет

Производные карборанов могут найти практическое применение для получения самоорганизующихся монослойных покрытий, что открывает возможность для суб-наноразмерного дизайна свойств макроскопической поверхности. Они проявляют физиологическую активность и являются перспективными высокоэффективными агентами для бор-нейтронозахватной диагностики и терапии онкологических заболеваний.

Целью настоящей работы является квантово-химическое моделирование холестеринových эфиров о-, м- и п-карборан-С-карбонových кислот (I-III).

Ранее нами были синтезированы холестеринových эфиры о-карборан-С-карбоновой кислоты (I) [1] и м-карборан-С-карбоновой кислоты (II) [2], имевших природное содержание изотопов бора. Важными параметрами, характеризующими поведение этих веществ, являются характеристики их электронной структуры и относительной устойчивости.

С целью оценки устойчивости изомерных холестеринových эфиров о-, м- и п-карборан-С-карбонových кислот (I-III), изучения их электронной структуры и строения, нами были проведены неэмпирические квантово-химические расчеты этих соединений с использованием метода теории функционала плотности (density functional theory) DFT с применением уровня теории B3LYP/6-31++(d, p) по программе GAMESS [3]. Рассчитаны полные энергии систем (E), энергии верхней занятой молекулярной орбитали ($E_{ВЗМО}$), энергии нижней вакантной молекулярной орбитали ($E_{НВМО}$) и дипольные моменты (таблица). Значения энергий приведены в атомных единицах энергии (хартри, а.е.).

Таблица – Данные неэмпирических квантово-химических расчетов соединений (I-III), вычисленных методом DFT

№	I	II	III
E , а.е	-1576,225195	-1576,248146	-1576,252709
$E_{ВЗМО}$, эВ	-6,683	-6,533	-6,432
$E_{НВМО}$, эВ	-0,242	0,816	-1,067
Дипольн. момент, Дб	7,11	5,23	2,58

Геометрические параметры м-карборан-С-карбонového фрагмента холестеринového эфира (II), полученные путем расчетов, хорошо согласуются с данными рентгено-