В.В. САБАДАШ (УКРАЇНА, ЛЬВІВ)

КВАНТОВО-ХІМІЧНИЙ РОЗРАХУНОК АДСОРБІЦІЙНОЇ СИСТЕМИ ЦЕОЛІТ- ОКСІПРОПІОНОВА КИСЛОТА

Національний університет «Львівська політехніка»
Національний університет «Львівська політехніка» м.Львів, вул. с.Бандери 12

The linear dimensions of the molecule, namely bond lengths, angles degree between the atoms and dihedral angles were calculated. The greatest linear dimension of lactic acid molecule is 1.46 nm, smallest - 0.89 nm. Thus it can be concluded that due to the polarity of molecules of lactic acid it can be adsorbed as zeolite as well as carbon sorbents. Regarding of the molecule size, then this compound may be adsorbed in the pore structure of the sorbent with a cross section of the pores not less than 1.46 nm and on the outer surface of zeolite.

Деякі задачі теорії адсорбції як одного з видів взаємодії молекул адсорбата з поверхнею твердого тіла безумовно вимагають квантовомеханічного розгляду. В даний час є вже досить багато робіт, присвячених квантовомеханічним задачам теорії адсорбції, і представляється можливим зробити огляд цих робіт з єдиної точки зору.

В даний час комп'ютерне моделювання на основі методів квантової хімії і молекулярної динаміки електронної і атомної структур молекулярних і кластерних систем перехідних нанорозмірів різної складності набуло широке поширення. Квантово-хімічні методи з великою точністю, не удаючись до дорогого експерименту, дозволяють не тільки розрахувати властивості окремих молекулярних систем, але і виявляти загальні закономірності, властиві класам сполук, обґрунтовувати існуючі закономірності, здійснювати розрахунок коефіцієнтів кореляції. Як відомо, в основі квантово-хімічних розрахунків лежить розв’язок рівняння Шредінгера.

Проте навіть для багатоелектронних атомів і тим більше для багатоатомних систем рішення рівняння точним чисельним методом неприйнятне через дуже велику кількість розрахункового часу. Точне рішення неможливе навіть для молекули водню. Послідовне застосування наближеного метода рішення рівнянь Хартрі-Фока-Рутаана - методу самоузгодженого поля – для молекул, що складаються всього з декількох атомів, не піддаватися обчисленню. З цієї причини в квантовій хімії значення придбавають напівемпіричні (наближені) методи рішення цього рівняння. На сьогоднішній день в світі існує багато обчислювальних комплексів і програмних продуктів, в яких реалізовані методи квантової хімії. Вони включають програми,що реалізують методи молекулярної механіки, квантової хімії і молекулярної динаміки.

Проведено розрахунок дескрипторів молочної кислоти за допомогою квантово-хімічних розрахунків в програмному середовищі «ChemOffice/Chem3D» . Для дослідження були вибрані ті характеристики структури молекул, за якими можна спрогнозувати можливість проходження процесу адсорбції молочної кислоти у внутрішньо дифузійній області. Було визначено електронні, електростатичні, геометричні, стеричні, топологічні, конституційні та енергетичні параметри. Зокрема було розраховано величини зарядів на окремих атомах. Відповідно до отриманих величин зарядів – ефективні заряди на атомах кисню досліджуваних сполук мають значення від –0,217 до -0.406. Величини ефективних зарядів на атомі азоту піридинового циклу для всіх сполук характеризуються значеннями від –0,072 до –0,276. Значення величини заряду на атомі O_8 карбоксильної групи становить –0,39, а на атомі кисню гідроксильної групи O_4 – 0,35. Заряди атомів вуглецю: групи C_1 – 0,035, а найбільше значення C_3 0,31 За величиною дипольного моменту оксіпропіонова кислота є полярною, причому дипольні моменти мають величину від –0,356 до 1,355 дебай, магнітуда 1,402 дебай. Розраховано лінійні розміри молекули, а саме: довжини зв’язків, градусну міру кутів між атомами та двогранних кутів. Найбільший лінійний розмір молекули молочної кислоти становить 1,46 нм. найменший – 0,89 нм. Таким чином можна зробити висновок, що внаслідок полярності молекули, оксіпропіонову кислоту можна сорбувати як цеолітом, так і вуглецевими сорбентами. Щодо розмірав молекули, то дана сполука може сорбуватися в поровій структурі сорбенту з поперечним перерізом пор не менше 1,46 нм та на зовнішній поверхні цеоліту.

Lviv Polytechnic National University Institutional Repository http://ena.lp.edu.ua