

**Таблица 3.** Теоретически рассчитанные физико-химические характеристики молекулы диметиламиноарглатина  $C_{17}H_{25}O_3N$ 

Параметр	Метод B3LYP/6-31G(d)	Параметр	Метод B3LYP/6-31G(d)
$*E_{it}$ , ат. ед	-943,2484362	Вращательные постоянные, ГГц	0,48394 0,21925 0,16118
$**E_0$ , ккал/моль	251,82380	$S_{298}^0$ , кал/(моль • К) трансляционная вращательная колебательная	146,387 (полная) 42,904 34,196 69,287
$\Delta_f H_{298}^0$ , ккал/моль	-942,825957		
$\Delta G_{298}^0$ , ккал/моль	-942,895510		Дипольный момент, Д x-компонента y-компонента z-компонента

Примечание: \* – полная энергия молекулы; \*\* – Энергия нулевых колебаний молекулы.

Таким образом, полученные результаты в дальнейшем можно использовать для сравнения с экспериментальными данными.

### Список литературы

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., et al. Gaussian 03, Revision C.02, Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2004.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОКАЗАТЕЛЯ ЦВЕТНОСТИ АЛКИЛБЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТЫ

А.В. Шандыбина, Е.В. Дорожко

Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.Н. Ивашкина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, avs66@tpu.ru

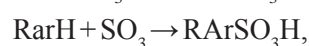
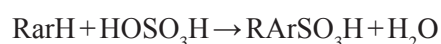
В последние 30 лет синтетические моющие средства (СМС) получили широкое распространение в мире. Моющие средства обладают свойствами поверхностно-активных веществ, обусловленные строением их молекул, в которых присутствуют гидрофильная и гидрофобная (полярная и неполярная) группы. Сравнительно недавно для производства моющих веществ использовалось значительное количество жиров природного характера (растительных масел и животных жиров). С использованием жидких нормальных парафинов для этих целей жиры высвобождаются, увеличивая тем самым ресурсы для обеспечения потребностей человека. Потребность в них будет расти и в третьем тысячелетии, поэтому будет увеличиваться и производство основного компонента синтетических моющих веществ – линейных алкилбензолсульфонатов (ЛАБС).

ЛАБС представляют собой химические вещества с насыщенной углеводородной цепью

из 10–13 атомов углерода, связанных с одной или несколькими сульфогруппами. Эти вещества являются одним из распространенных анионов, используемых для производства синтетических моющих средств [1].

Такое производство реализовано в России на нефтеперерабатывающем заводе ООО «ПО «Киришинефтеоргсинтез». В качестве сырья используется керосиновая или дизельная фракции нефти, из которых селективно извлекают парафины, пригодные для получения линейных алкилбензолов (ЛАБ).

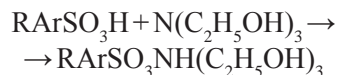
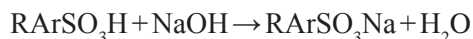
ЛАБ не являются поверхностно-активными веществами, поэтому их подвергают сульфированию – присоединению молекулы серного ангидрида  $SO_3$ , в результате чего получается АБСК – алкилбензолсульфокислота:



где R – углеводородный радикал от  $C_{10}$  до  $C_{14}$ ,

ArH – бензол.

АБСК может использоваться как компонент СМС только после ее нейтрализации различными щелочами, например, триэаноламином, с целью получения нейтрального или слегка щелочного продукта [2]:



По цвету кислоты, выходящей из колонны регенерации, можно судить о ее качестве. Цвет изменяется от почти прозрачного до темно-коричневого, что свидетельствует о насыщении кислоты тяжелыми ароматическими соединениями и неудовлетворительной работе колонны.

Основной проблемой является ухудшение показателя цветности получаемой АБСК с течением времени (кислота темнеет через нескольких дней/недель). Цвет является показателем степени сульфирования. С изменением цвета ухудшаются некоторые свойства, увеличивается

содержание серной кислоты в АБСК, в связи с этим образуются смолистые соединения, увеличивается плотность кислоты. Большое внимание уделяется сохранению цвета АБСК в течение длительного времени.

Проведенные исследования позволили определить степень окраски растворов алкилбензолсульфокислоты эталонным методом оценки цвета, путём сравнения с эталонами жидкости коричневых оттенков. Эталонные растворы готовили в соответствии с ОФС 42-0050-07 (ГФ XII). Цветность или цвет является условно принятой качественной характеристикой для жидкостей, имеющих незначительную окраску [3].

Результаты исследования показали, что два раствора исследуемой АБСК разной концентрации имеют окраску коричневых оттенков, соответственно с увеличением концентрации увеличивается степень окраски. Свежеполученная кислота прозрачного цвета, но в процессе «старения» она становится тёмно-коричневого цвета.

### Список литературы

1. Баннов П.Г. *Процессы переработки нефти.* – М.: ЦНИИТЭ-нефтехим, 2011. – 429с.
2. Эфрос Л.С., Квитко И.Я. *Химия и технология ароматических соединений в задачах и упражнениях.* – Л.: Химия, 2005. – 496с.
3. 42-0050-07 (ГФ XII). *Государственная фармакопейная статья №12.*

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИСТИННОЙ ПОВЕРХНОСТИ ЭЛЕКТРОДА МЕТОДОМ ИНВЕРСИОННОЙ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИИ

А.Б. Шашков, Ю.А. Оськина

Научный руководитель – д.х.н., профессор Н.А. Колпакова

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, msmtolya@yandex.ru*

Токи как катодных, так и анодных процессов в электрохимических методах анализа зависят от площади поверхности электрода. Введение на поверхность электрода модификаторов увеличивает истинную поверхность электрода, что приводит к увеличению токов электровосстановления ионов или электроокисления металлов. В литературе описаны различные способы оценки истинной поверхности электрода при электрохимических измерениях [1]. Поверхность электрода, модифицированную платиной или родием, можно оценивать по адсорбционным пикам водорода и кислорода.

Целью данной работы было оценить истин-

ную поверхность электрода, занятую платиной или родием, электроосажденными на поверхность графитового электрода на стадии предварительного электролиза, методом инверсионной вольтамперометрии по пикам селективного электроокисления ртути из бинарного электролитического осадка с платиной или родием.

Все измерения проводились на вольтамперометрическом анализаторе ТА-4 производства НПП «Томьаналит» (г. Томск) в комплекте с ПК. Для измерения тока использовали трехэлектродную ячейку, в которой рабочим электродом служил импрегнированный полиэтиленом низкого давления графитовый электрод (ГЭ), элек-