Ю. Ю. Ерошина, И. Н. Изотова, А. С. Андриянов,
А. В. Костюк

МЕТОДИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ «ОБРАЩЕННАЯ ГАЗОВАЯ ХРОМАТОГРАФИЯ ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ»

Ключевые слова: обращенная газовая хроматография, термодинамика взаимодействия, расчет многопараметрических функций, программирование.

Предложена методика и программа обработки экспериментальных данных, получаемых в ходе выполнения лабораторных работ по методу обращенной газовой хроматографии, для полимеров и их смесей.

Keywords: inverse gas chromatography, the thermodynamics of the interaction, the calculation of multivariable functions, software.

The technique and the software processing calculate the characteristic parameters and the thermodynamic functions for polymers and polymer blends. The experimental data obtained in the course of laboratory work by the method of inverse gas chromatography

Обращенная газовая хроматография (ОГХ) представляет собой неаналитический метод газовой хроматографии, направленный на определение термодинамических и структурных характеристик высокомолекулярных соединений и позволяет рассчитать и оценить такие характеристические параметры, как температура фазовых переходов, степень кристалличности, параметры термодинамического взаимодействия Флори — Хаггинса для систем полимер — растворитель, а также для исследования кинетики кристаллизации полимеров из расплава [1,2]. Публикации последних лет показывают, что он может успешно применяться для оценки поверхностных свойств полимеров [5,6], определения параметров растворимости, степени кристалличности смесей полимеров и сополимеров [7], влияния наполнителей на термодинамические свойства бинарных полимерных систем [3,4].

Поскольку в ОГХ используется непосредственное взаимодействие стандартных хроматографируемых летучих соединений с исследуемой полимерной фазой и установление определенных связей между характеристиками этих летучих соединений со свойствами полимерной фазы, то этот метод может рассматриваться как прямой метод исследования высокомолекулярных соединений.

В основе физико-химических измерений с помощью газовой хроматографии лежит связь между значениями определяемых величин с параметрами хроматографических зон. Основным параметром, определяемым в газовой хроматографии, является время удерживания (или удерживаемый объем) сорбата неподвижной фазой. Время удерживания максимума зоны компонента является функцией его коэффициента активности, что позволяет определить коэффициенты активности и другие термодинамические характеристики жидких и твердых тел, используемых в качестве неподвижных фаз. Исходя из температурной зависимости удерживаемых объемов, можно найти важнейшие характеристики смешения — энтальпию и энтропию [1,2].

Ознакомление студентов с возможностями применения метода ОГХ является неременным

компонентом программы изучения курса физико-химии полимеров. Несмотря на простоту и доступность аппаратного оформления эксперимента возникают существенные проблемы при обработке результатов. Сложности возникают не только при расчете многопараметрических функций, включающих значения скорости газа-носителя, перепада давления на выходе из колонки, температуры процесса, молекулярных характеристик полимеров и используемых сорбатов – в целом, порядка 20 величин, но и на стадии интерпретации расчетных данных.

В отдельных публикациях [2,3] помимо результатов исследований предложены модели для описания газохроматографических процессов при различных физических состояниях неподвижной полимерной фазы, позволившие существенно увеличить точность эксперимента и интерпретацию получаемых экспериментальных данных, например при оценке температур стеклования, степени кристалличности, параметров термодинамического взаимодействия в системах полимер — растворитель, полимер — полимер и др.

Существенно помочь студентам при выполнении лабораторных работ по методу ОГХ [8] позволяет компьютерная программа, разработанная на кафедре «Химии и технологии высокомолекулярных соединений».

Программа носит обучающий характер и представляет собой учебно-методическое пособие. Интерфейс программы представлен предельно просто и понятно при условии минимального знания ПК. Студенты, после изучения справочного теоретического материала, могут оформить одну из трех лабораторных работ в тетрадах и выполнить необходимые действия с исследуемыми полимерами для получения экспериментальных результатов. Для этих целей предусмотрено поэтапное выведение на монитор компьютера информационного материала в привычной для студентов форме: теория; цель работы; необходимые образцы, реактивы, приборы и принадлежности; методика выполнения работы. После практического выполнения работы остается ввести в программу параметры и результаты опыта и распечатать расчетные данные в виде таблицы и

графиков. Характеристические параметры сорбатов, газа-госителя и воздуха в исследуемом диапазоне температур взяты из справочных изданий. В качестве исходных данных для расчета в соответствующие поля необходимо занести следующие экспериментальные величины: температуру окружающего воздуха, атмосферное давление, молекулярную массу полимера(ов), измеренные времена удерживания сорбатов (в мм. диаграммной ленты с учетом скорости её движения). Рассчитываемые величины выводятся на экран ПК в виде таблиц, на одном листе с исходными данными, что облегчает дальнейшую обработку и анализ полученных данных. Такая форма подачи материала существенно сокращает время на выполнение лабораторных работ по методу ОГХ и позволяет включить их в программу лабораторного практикума.

Программа реализована на языке C# с использованием Framework 3.5. Для работы программы необходимо:

- минимальное программное обеспечение: Microsoft internet Explorer 6.0 с пакетом обновления 1 (SP1), компоненты доступа к данным MDAC 2.8 для приложений доступа к данным, установщик Windows версии 3.0;
- процессоры: минимальная частота – 400МГц, рекомендуемая – 1ГГц;
- ОЗУ: минимальная память 96 мегабайт, рекомендуемая – 256 МБ;
- пространство на жестком диске: для 32-разрядной ОС – 280 МБ, для 64-разрядной ОС – 610 МБ.

Применение программируемой обработки экспериментальных данных по результатам ОГХ

позволяет использовать данный метод при изучении полимеров и их смесей в широком диапазоне температур и помогает существенно сократить время на исследование, а также значительно повышает достоверность расчетных данных. Программа выполнена в достаточном для студентов объеме, но для дальнейшего совершенствования планируется добавить статистическую обработку результатов и создать базу данных по результатам исследований различных полимеров, что, несомненно, будет ценным вкладом в области знаний физико-химии полимеров и их смесей.

Литература

1. А.Е. Нестеров, Ю.С. Липатов, *Обращенная газовая хроматография в термодинамике полимеров*, Наукова думка, Киев, 1976. 128 с.
2. А.Е. Нестеров, Ю.С. Липатов, *Термодинамика растворов и смесей полимеров*, Наукова думка, Киев, 1984. 300 с.
3. Ю.П. Ямпольский, С.Г. Дургарьян, В сб. *Хроматография и термодинамика. Определение физико-химических параметров*, ИФХПНР, Варшава, 1986. 185 с.
4. О.К. Барашков, Р.С. Барштейн, *Высокомолек. соед., Сер. А.*, **30**, 4, 686-699 (1988)
5. Н.В. Баранова, Л.А. Пашина, А.В. Косточко, *Вестник казанского технол.ун-та*, **16**, 1, 127-131 (2013)
6. Н.В. Баранова, Л.А. Пашина, А.В. Косточко *Вестник казанского технол.ун-та*, **15**, 15, 172-176 (2012)
7. А.В. Косточко, З.Т. Валишина, М.В. Лузянина, Н.И. Наумкина, *Вестник казанского технол.ун-та*, **15**, 9, 45-48 (2012)
8. В.Ф. Куренков, Л.А. Бударина, А.Е. Заикин, *Практикум по химии и физике высокомолекулярных соединений*, КолосС, Москва, 2008. 395 с.

© Ю. Ю. Ерошина – к.т.н., специалист по УМР, доц. каф. ХТВМС КНИТУ, smvjulia@mail.ru; И. Н. Изотова – специалист по УМР, ст. препод. той же кафедры, inizotova70@mail.ru; А. С. Андриянов – выпускник КНИТУ (КАИ); А. В. Косточко – д.т.н., проф., зав. каф. ХТВМС КНИТУ, htvmc@kstu.ru.