

**УЧЁТ ВЛИЯНИЯ КОНФОРМАЦИОННОЙ ПЕРЕСТРОЙКИ
МАКРОМОЛЕКУЛЫ НЕПОДВИЖНОЙ ФАЗЫ ПРИ РАСЧЁТЕ
КОНСТАНТ ГЕНРИ.**

А. Г. Прудковский, А. М. Долгонос

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И.Вернадского РАН, г.Москва

В лаборатории Сорбционных методов ГЕОХИ РАН разработаны компьютерные программы, моделирующие различные виды хроматографических процессов. В том числе создана программа “Т-Henry”, рассчитывающая константы Генри для различных условий сорбции, а также “GeoMol”, моделирующая процесс взаимодействия молекул адсорбата с твёрдыми и полимерными (жидкими) фазами. Программа тестировалась на простейших сорбентах, таких как графит и сквалан. В процессе тестирования обнаружены отклонения от основной теории взаимодействия полимерной фазы с некоторыми молекулами адсорбата. Нами показано, что взаимодействие полимерной фазы с молекулами адсорбата существенно зависит от относительного размера обеих молекул и наличия циклических образований. Для крупных молекул адсорбата полимерную фазу можно считать относительно плоской. Небольшие молекулы могут вызвать конформационную перестройку полимерной фазы с образованием сферической полости вокруг молекулы адсорбата. Однако эффект этот достигается только для молекул, содержащих кольцевые структуры, фиксирующие молекулы на водородных атомах полимера. Вычисление константы Генри, описывающей сорбцию подобных молекул, представляет определённую проблему, пути решения которой представлены в докладе. Результаты расчетов, подтверждаются экспериментальными данными, взятыми из литературы.