

Министерство общего и профессионального образования
Российской Федерации
Удмуртский государственный университет
Физико-технический институт УрО РАН
Институт прикладной механики УрО РАН
Институт истории языка и литературы УрО РАН
Естественно-гуманитарный научно-образовательный комплекс
Комитет по науке, высшему и среднему профессиональному
образованию при Правительстве Удмуртской Республики

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**4-й РОССИЙСКОЙ УНИВЕРСИТЕТСКО-АКАДЕМИЧЕСКОЙ
НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

ЧАСТЬ 2

Ижевск 1999

итоге выводятся из сферы реакции. Предположено, что образующаяся при $pH > 4$ поверхностная оксидная пленка обладает слабыми защитными свойствами и легко разрушается ClO_4^- - ионами. В растворах с высокой ионной силой ClO_4^- - ионы препятствуют образованию оксидной пленки на меди и анодное растворение протекает равномерно на всей поверхности металла.

Особенности изменения электропроводности растворов объяснены сравнительно малой склонностью анионов ClO_4^- к гидратации. На основании полученных данных сделан вывод об электрохимической активности ClO_4^- - ионов, что необходимо учитывать при изучении механизмов анодного растворения металлов. Предложены схемы механизмов анодного растворения меди в 0,1M $NaClO_4$ в интервалах pH 2-4 и 4-9,5, включающие параллельные лимитирующие стадии и предполагающие возможность участия ClO_4^- -ионов в промежуточных стадиях процесса.

И.Б.ШИРОБОКОВ

Удмуртский университет, Ижевск

О ПРИМЕНИМОСТИ ТЕОРИИ ПЕРКОЛЯЦИИ К ОБЪЯСНЕНИЮ ИНГИБИРУЮЩЕГО ДЕЙСТВИЯ СОЛЕЙ ТЕТРААЛКИЛАММОНИЯ В КИСЛЫХ БРОМИДНЫХ РАСТВОРАХ

Четвертичные соли аммония (СЧА) эффективно тормозят кислотную коррозию металлов в присутствии галид-ионов. В частности, ингибирующее действие СЧА объясняется структурированием растворителя (воды) в диффузной части ДЭС за счет образования поверхностного адсорбционного слоя ионов тетраалкиламмония (ТАА) и, как следствие, изменения условий разряда ионов деполяризатора на поверхности металла.

Данные факты хорошо объясняются с привлечением метода перколяции. Если объем адсорбированного слоя разбить на небольшие ячейки, в центре которых может находиться ион ТАА, то каждая такая ячейка может находиться в двух состояниях: "занято" или "пусто". Под понятием "пусто" следует понимать ячейку заполненную только молекулами воды. Если "занятая" ячейка окружена "пустыми" ячейками, то такую систему можно рассматривать как гидратированный ион ТАА. Переход ячейки из

состояния "пусто" в состояние "занято" осуществляется с вероятностью пропорциональной концентрации ионов ТАА и расстоянию от поверхности электрода. Занятые ячейки могут быть либо изолированы друг от друга, либо образовывать группы из ближайших соседей. Группа связанных ячеек представляет собой изолирующий кластер, который нарушает структурную непрерывность чистой воды вблизи поверхности. В "пустых" ячейках, заполненных молекулами воды, протон может передаваться по туннельному механизму. По мере увеличения концентрации ионов ТАА число изолирующих кластеров растет, разрушая исходную систему водородных связей. Иначе говоря, происходит разрушение исходного соединяющего кластера из молекул воды и изолирование поверхности электрода. Другим возможным эффектом, связанным с дроблением исходного кластера из молекул воды, является как бы прорастание изолирующих кластеров из ионов ТАА сквозь объем адсорбционного слоя с повышением температуры, что связано с разрушением гидратных оболочек вследствие увеличения подвижности отдельных молекул воды. Это также приводит к увеличению защитного эффекта через увеличение концентрации изолирующих кластеров.

И.Б.ШИРОБОКОВ, М.А.МОЩЕВИТИН, М.А.ПЛЕТНЕВ

Удмуртский университет, Ижевск

ОБОСНОВАНИЕ ВЫБОРА МЕТОДА РАСЧЕТА МОЛЕКУЛЯРНОГО СТРОЕНИЯ АЛИФАТИЧЕСКИХ АМИНОВ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К КОРРОЗИОННЫМ ИССЛЕДОВАНИЯМ НА ПРИМЕРЕ МЕТИЛАМИНА

Амины алифатического ряда и его производные являются эффективными ингибиторами процесса коррозии в кислых и слабокислых средах. Для изучения механизмов защитного действия данного класса соединений применительно к коррозионным процессам важно установление их молекулярной и ионной структур как в геометрическом, так и в энергетическом аспекте. Одним из методов решения этой задачи является квантовохимический расчет. В данной работе изучено строение молекул ряда алифатических аминов на примере метиламина с использованием следующих методов: CNDO, INDO, MINDO/3, MNDO. Обоснование выбора метода квантовохимического расчета показано на примере первого представителя ряда аминов – метиламин NH_2CH_3 .