



**МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД
по общей и прикладной химии
— ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ —**

**ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ
ХИМИЧЕСКОЙ НАУКИ**

21-26 сентября 2003 г.

г. Казань

ВЛИЯНИЕ КАТИОНОВ ТЕТРААЛКИЛАММОНИЯ НА СТРУКТУРУ ВОДЫ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

И.Б. Широбоков, М.А. Плетнев

Удмуртский государственный университет,
Россия, 426037, г. Ижевск, ул. Университетская, 1 (E-mail: bhf70@uni.udm.ru)

Ингибирующее действие симметричных солей тетраалкиламмония (ТАА) на катодное выделение водорода в кислых растворах возрастает при увеличении длины углеводородного радикала, из-за их способности влиять на структуру воды в приэлектродном слое и на транспорт ионов водорода к поверхности металла.

В настоящей работе методом молекулярной динамики (пакет TINKER v3.9, © 1990-2001 by Jay W. Ponder) изучен процесс гидратации катионов: $[(\text{CH}_3)_4\text{N}]^+$ – $[(\text{C}_5\text{H}_{11})_4\text{N}]^+$. Расчет осуществлялся с использованием потенциала OPLSAA в NPT-ансамбле для систем с 512 молекулами воды, в кубической ячейке с ПГУ.

В ходе расчетов были определены: координационные числа, радиусы первой и второй гидратной оболочки и значения коэффициентов самодиффузии молекул воды в них, построены функции радиального распределения для изучаемых катионов ионов в интервале температур 273–373 К. Расчеты показали различие в строении гидратных оболочек катионов $[(\text{CH}_3)_4\text{N}]^+$ – $[(\text{C}_2\text{H}_5)_4\text{N}]^+$ и $[(\text{C}_4\text{H}_9)_4\text{N}]^+$ – $[(\text{C}_5\text{H}_{11})_4\text{N}]^+$.

Радиус $[(\text{CH}_3)_4\text{N}]^+$ и $[(\text{C}_2\text{H}_5)_4\text{N}]^+$ совпадает с размерами полостей в структуре воды, что позволяет предполагать, что они могут либо внедряться в существующие полости, либо создавать их, что не оказывает существенного влияния на исходную систему водородных связей. Размеры катионов $[(\text{C}_4\text{H}_9)_4\text{N}]^+$ и $[(\text{C}_5\text{H}_{11})_4\text{N}]^+$ существенно больше (до 7,5 Å) существующих пустот, что приводит к возникновению новой системы водородных связей в формировании которой существенную роль играют пронизывающие объем системы углеводородные радикалы, в пространстве между которыми располагаются как отдельные молекулы воды, так и небольшие ассоциаты из молекул воды.

Полученные результаты подтверждают гипотезу о связи ингибирующего действия катионов тетраалкиламмония с их способностью влиять на структуру воды в приэлектродном слое.