

Государственный Комитет по науке, высшему и среднему
профессиональному образованию при Правительстве
Удмуртской Республики
Удмуртский государственный университет
Союз НИО Удмуртской республики
Дом науки и техники

Третья
Международная школа-семинар

**СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ
ИССЛЕДОВАНИЯ И ПРЕДУПРЕЖДЕНИЯ
КОРРОЗИОННЫХ РАЗРУШЕНИЙ**

Тезисы докладов

Издательский Дом «Удмуртский университет»
Ижевск 2001

УДК 620

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ТЕТРААЛКИЛАММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ СТАТИСТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

© И.Б. Ширококов, А.В. Назаров

Удмуртский госуниверситет, г. Ижевск

Поступила в редакцию 14.01.2001 г.

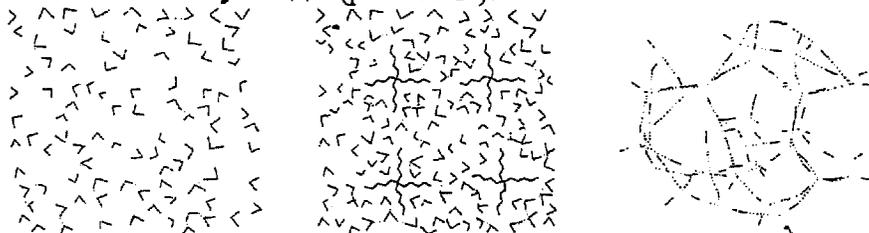
Тетраалкиламмониевые (ТАА) соли являются эффективными ингибиторами процесса коррозии в кислых и слабокислых средах. Из литературы известно: 1) вода обладает определенной структурой; 2) перенос протона в воде протекает по двум существующим и параллельно идущим механизмам: эстафетному и туннельному; 3) соли ТАА оказывают сильное влияние на структуру воды.

Поэтому можно предположить, что соли ТАА, оказывая сильное влияние на структуру воды, могут изменить механизм передачи протона к поверхности металла и, следовательно, изменить скорость катодного выделения водорода, что приводит к изменению скорости коррозии в кислых средах.

На основании вышесказанного ранее нами была выполнена серия экспериментальных работ по изучению влияния солей ТАА на кинетику катодного выделения водорода [1] в кислых растворах. Развитие компьютерной техники позволяет изучить строение растворов ТАА солей на микроуровне на примере иона тетрапентиламмония (TPA^+).

Расчеты были проведены с использованием пакета TINKER (© J.W. Ponder) с применением потенциала OPLS. Из проведенных расчетов следует, что в силу малой плотности заряда катиона TPA^+ ион – дипольное взаимодействие оказывается недостаточным для создания прочной и плотной гидратной оболочки, что приводит к обобществлению гидратных оболочек катионов

ТРА⁺. Углеводородные цепи образуют вокруг как бы пространственную сетку и удерживают в своем окружении большое количество молекул воды (рис. 1б-в).



а)

б)

в)

Рис. 1. а) первоначальная структура воды;
б, в) структурирование ионами ТАА⁺ воды.

Таким образом создается как бы “надструктура”, где определяющую роль в её формировании играет система углеводородных радикалов, и где теперь уже в пространстве между углеводородными радикалами располагаются как отдельные молекулы воды, так и небольшие ассоциаты из нескольких молекул воды. Тем самым, такая вода становится менее “подвижной” и приобретает “новую” структуру, отличную от той, когда в системе не присутствовала добавка ТРА (рис. 1а).

Таким образом, “новая” структура воды будет являться более эффективным переносчиком протона, чем “прежняя”, в силу своей устойчивости (преобладанию туннельного механизма передачи протона), что было ранее показано в серии экспериментальных работ.

Литература

1. Ширококов И. Б., Корепанова Т. А., Плетнев М. А., Решетников С. М. Защита металлов, 1994, Т. 30, № 6, с. 620 – 623.