

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. А.М. ГОРЬКОГО
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ХИМИИ

Тезисы докладов XX Российской молодежной
научной конференции, посвященной 90-летию
Уральского государственного университета
им. А. М. Горького

Екатеринбург, 20 – 24 апреля 2010 года

Екатеринбург
Издательство Уральского университета
2010

УДК 351
П 781

Печатается по решению
оргкомитета конференции

Конференция проводится
при поддержке гранта РФФИ №10-03-06802-моб_г

Редакционная коллегия:

И.Е. Анимца, А.А. Вшивков, С.А. Вшивков,
Т.В. Терзиян (отв. за вып.), Ю.П. Зайков, В.М. Жуковский, А.Ю. Зуев,
В.Н. Кожевников, А.Я. Нейман, Л.К. Неудачина,
В.И. Салоутин, А.П. Сафронов, В.Я. Сосновских, А.И. Суворова

П781 Проблемы теоретической и экспериментальной химии:
тез. докл. XX Рос. молодеж. науч. конф., посвящ. 90-летию
Урал. гос. ун-та. им А. М. Горького, Екатеринбург, 20 –
24 апр. 2010 г. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та,
2010. – 536 с.
ISBN 978-5-7996-0420-2

В сборнике представлены результаты исследований по пяти научным направлениям: аналитической химии; органической химии; физикохимии полимерных и коллоидных систем, технологии и электрохимии неорганических материалов; термодинамике и структуре неорганических систем.

Сборник может быть полезен специалистам, занимающимся вопросами теоретической и экспериментальной химии, а также студентам, аспирантам и научным сотрудникам химических факультетов вузов.

УДК 351

ISBN 978-5-7996-0505-6

© ГОУ ВПО «Уральский государственный
университет им. А. М. Горького», 2010

локомплексы 5,10,15,20-тетракис(3',5'-дитребутилфенил) порфирина
Дис канд хим наук Уфа 2006 120 с

2 Исламова Р М, Заикина А В, Насретдинова Р Н, Пузин Ю И, Семейкин А С, Койфман О И, Монаков Ю Б // Изв вузов Сер хим и хим технол 2006 Т 49 № 5 с 53-56

3 Laikov D N Priroda, electronic structure code Version 6 – 2006

4 Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M // Phys Rev Lett 1996 Vol 77 № 18. p 3865-3868

5 Лайков Д Н Развитие экономного подхода к расчету молекул методом функционала плотности, его применение к решению сложных химических задач Дис канд физ-мат наук Москва 2006 102 с

Расчеты выполнены с использованием кластерного суперкомпьютера ИОХ УНЦ РАН Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (код проекта № 07-03-12043-офи) и фондом Президента РФ по поддержке научных школ (грант НШ 2186 2008 3)

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЯ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ КОНДУКТОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ И МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Курамшина О И, Широбоков И Б ⁽¹⁾, Фахретдинов П С, Голубев И Ю ⁽²⁾

⁽¹⁾ Удмуртский государственный университет

426034, г Ижевск, ул Университетская, д 1

⁽²⁾ Институт органической и физической химии

Казанского научного центра РАН

420088, г Казань, ул Арбузова, д 8

Большинство ингибиторов коррозии соединения, по своим физико-химическим характеристикам относящиеся к типичным ПАВ, защитное действие которых часто определяется их взаимодействием с коррозионной средой с образованием ионных и мицеллярных растворов В качестве объекта исследований был выбран ряд веществ, синтезированных в ИОФХ им Арбузова КазНЦ РАН, относящихся к классу имидазолиновых Особенностью данных соединений является то, что они, являясь по своей природе ионогенными ПАВ, содержат значительно число оксигетиленовых цепочек (от 4 до 12)

Определение температурной зависимости величины критической концентрации мицеллообразования (ККМ) проводили двумя методами кондуктометрическим и на основании молекулярно-динамического расчета систем с различным соотношением числа молекул ПАВ к воде (от 1 200 до 1 1600) в рамках пакета GROMACS (v 4 0 5) с использованием силовых по-

лей OPLSAA для молекул ПАВ и SPC для молекул воды. Предварительная конфигурация исследуемых молекул ПАВ задавалась с помощью PRODGR сервера (<http://davapc1.bioch.dundee.ac.uk/prodrg>) с последующей геометрической оптимизацией с использованием метода PM3.

Анализ полученных результатов показывает, что в изученных системах наблюдается агрегация молекул ПАВ (мицеллообразование). При соотношении молекул ПАВ и молекул воды в соотношении 1:200 отмечается выделение ПАВ в виде отдельной фазы при всех изученных температурах. С увеличением соотношения ПАВ: вода до 1:1600 степень агрегации закономерно снижается, и наблюдаются формирование отдельных мицелл. Для образующихся мицелл можно отметить, что полярные группы молекул ПАВ ориентированы наружу (в сторону полярного растворителя), а неполярные углеводородные радикалы внутрь образующихся мицелл.

По результатам молекулярно-динамических расчетов были построены функции радиального распределения (ФРР), на основании которых были рассчитаны числа агрегации. Анализ зависимости чисел агрегации от концентрации и от температуры показывает, что с уменьшением концентрации ПАВ в изученных системах величины чисел агрегации уменьшаются. С ростом температуры происходит увеличение чисел агрегации для аналогичных систем. Концентрационные кривые чисел агрегации имеют резкий изгиб, который соответствует на наш взгляд ККМ. Величина ККМ данных соединений слабо зависит от температуры. Установлено, что с ростом температуры значение ККМ уменьшается, что характерно для неионогенных ПАВ (аналогичные результаты получились и в ходе кондуктометрических измерений).

Полученные двумя методами температурные зависимости величин ККМ позволили рассчитать термодинамические параметры процесса мицеллообразования. Показано, что мицеллообразование – процесс самопроизвольный: $\Delta G < 0$, $\Delta H > 0$, $T\Delta S > 0$ [1].

В целом можно отметить, что кондуктометрические измерения и молекулярно-динамические расчеты качественно согласуются между собой.

1. Сумм Б.Д. Объекты и методы коллоидной химии в нанохимии / Б.Д. Сумм // *Успехи химии*. – 2000. – Т. 69. – № 11. – С. 995–1007.