

КОМПЬЮТЕРНОЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГИДРОФОБИЗАЦИИ МИКРОСФЕР ДИОКСИДА КРЕМНИЯ СМОЛЯНЫМИ КИСЛОТАМИ

*Филиппов Дионис Демокритович,
Пирогов Максим Александрович,
Тараванов Максим Александрович,
Яковенко Андрей Антонович,
студенты*

*Гвозденко Алексей Алексеевич, ассистент
E-mail: dio5@mail.ru*

*Северо-Кавказский федеральный университет
г. Ставрополь, РФ*

Аннотация. Диоксид кремния, гидрофобизированный смоляными кислотами, является инновационным материалом для создания гидрофобных защитных покрытий, разработка которых является актуальной проблемой для большинства областей промышленности. В связи с этим в данной работе представлены результаты квантово-химического моделирования процесса гидрофобизации микросфер диоксида кремния смоляными кислотами: пимаровая, изопимаровая, левопимаровая, палюстровая, абиетиновая, неоабиетиновая, дегидроабиетиновая, дигидроабиетиновая и ламбертиановая кислоты. В работе рассматривалась полная энергия молекулярного комплекса (E), энергия высшей заселенной молекулярной орбитали (НМО), низшей свободной молекулярной орбитали ($LUMO$) и химической жесткости системы (η). Анализ полученных данных показал, что наиболее стабильной системой является взаимодействие атома кремния с дегидроабиетиновой кислотой, а наиболее энергетически выгодной системой является взаимодействие атома кремния с карбоксильной группой ламбертиановой кислоты. В работе рассматривались взаимодействие атома кремния с дегидроабиетиновой кислотой ($\eta = 0,140$ эВ).

Ключевые слова. Диоксид кремния, смоляные кислоты, гидрофобизация, квантово-химическое моделирование, химическая жесткость.

В настоящее время актуальной проблемой для большинства областей промышленности является разработка гидрофобных защитных покрытий, препятствующих проникновению влаги в различные материалы [1]. Данные покрытия найдут широкое применение как в промышленности, так и в быту [2, 3]. Одним из актуальных материалов для создания таких покрытий является диоксид кремния, гидрофобизированный смоляными кислотами.

Таким образом, целью данной работы является моделирование процесса гидрофобизации микросфер диоксида кремния смоляными кислотами с помощью компьютерного квантово-химического моделирования. Квантово-химическое моделирование взаимодействия диоксида кремния со смоляными кислотами проводилось в программе *QChem* с использованием молекулярного редактора *IQmol*. Параметры моделирования: силовое поле – *Ghemical*, метод – *HF*.

Взаимодействие диоксида кремния проводилось со смоляными кислотами: пимаровой, изопимаровой, левопимаровой, палюстровой, абиетиновой, неоабиетиновой, дегидроабиетиновой, дигидроабиетиновой и ламбертиановыми кислотами. Значения полной энергии (E) молекулярной системы, энергии НМО и $LUMO$ и химической жесткости системы (η), которая характеризует стабильность системы [4], взаимодействий представлено в таблице.

Результаты компьютерного квантово-химического моделирования

Взаимодействие с диоксидом кремния	Смоляные кислоты	E , ккал/моль	E_{HOMO} , эВ	E_{LUMO} , эВ	η , эВ
Взаимодействие атома кремния с карбоксильной группой смоляной кислоты	Пимаровая	-1360,030	-0,253	-0,005	0,129
	Изопимаровая	-1360,096	-0,250	0,003	0,124
	Левопимаровая	-1360,121	-0,242	-0,017	0,130
	Пальмистовая	-1360,148	-0,246	-0,005	0,126
	Абиетиновая	-1360,134	-0,243	-0,010	0,127
	Неоабиетиновая	-1360,137	-0,250	-0,006	0,128
	Дегидроабиетиновая	-1359,749	-0,241	-0,039	0,140
	Дигидроабиетиновая	-1361,256	-0,245	-0,001	0,123
	Ламбертиановая	-1433,537	-0,224	-0,021	0,123

Согласно литературным данным, *HOMO* и *LUMO* являются основными орбиталями, характеризующими химическую устойчивость системы. Химическая жесткость характеризует стабильность системы [5].

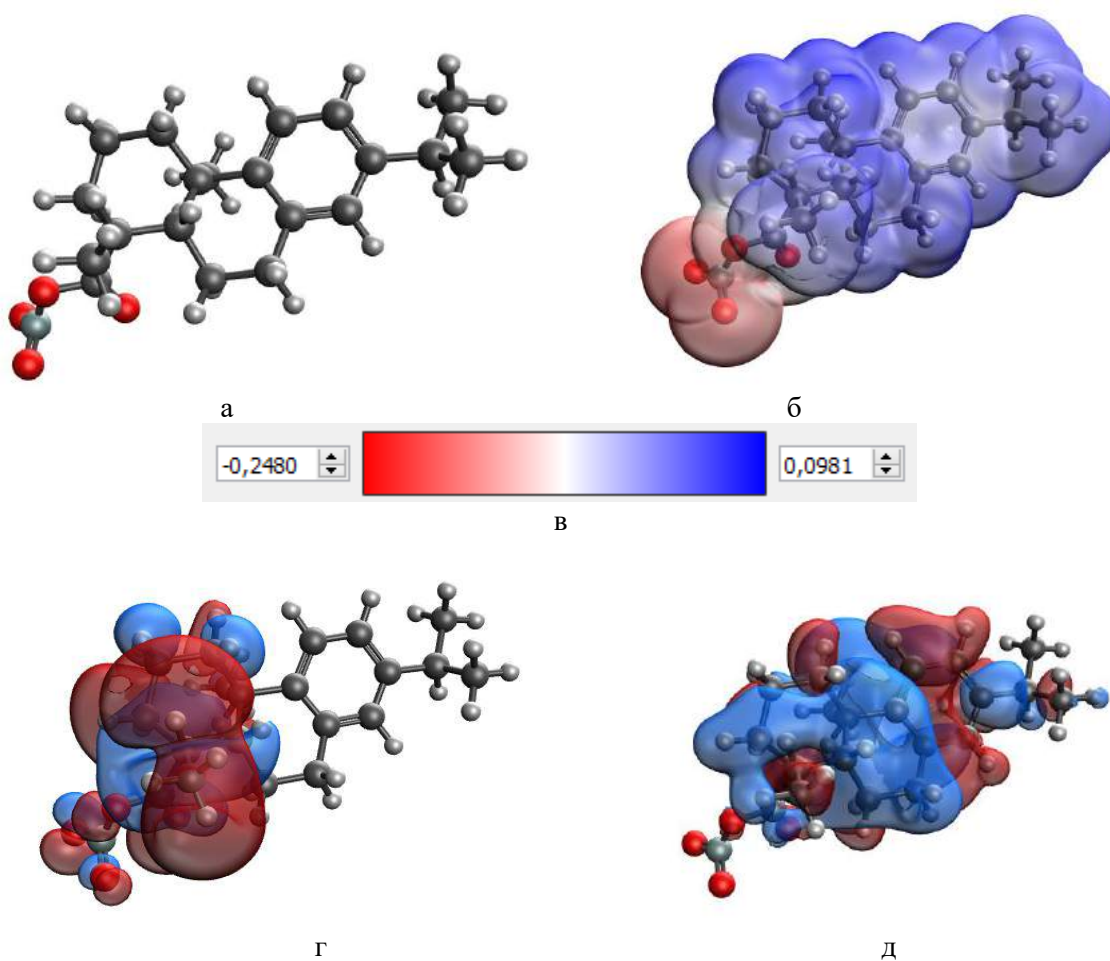


Рисунок. Результаты моделирования взаимодействия диоксида кремния с дегидроабиетиновой кислотой, в котором соединение с кремнием происходит

через карбоксильную группу дегидроабиетиновой растительной смоляной кислоты:
модель молекулярного комплекса (а), распределение электронной плотности (б),
градиент распределения электронной плотности (в), высшая заселенная молекулярная орбиталь
НМО (г), низшая свободная молекулярная орбиталь *LUMO* (д)

В ходе анализа полученных данных можно сделать вывод о том, что молекулярный комплекс атома кремния и карбоксильной группы дегидроабиетиновой кислоты является наиболее стабильным из всех представленных (абсолютная химическая жесткость составила $\eta = 0,140$ эВ), а наиболее энергетически выгодным является взаимодействие атома кремния с карбоксильной группой ламбертиановой кислоты ($E = -1433,537$ ккал/моль).

Библиографический список

1. Liu Y. et al. Preparation of a superhydrophobic coating based on polysiloxane modified SiO₂ and study on its anti-icing performance // Surface and Coatings Technology. – 2022. – Т. 437. – С. 128359.
2. Гидрофобные композиционные материалы для формирования защитных покрытий на металлических поверхностях в нефтегазовой промышленности / Д. Г. Маглакелидзе [и др.] // Практические аспекты нефтепромысловой химии. – 2022. – С. 77–78.
3. Фадеев, П. В. Применение наноструктурных покрытий в судостроении и судоремонте : науч.-исслед. работа / П. В. Фадеев, М. В. Огнева, Д. А. Усиков. – Мурманск. – 15 с. – Вход: свободный. – URL: <https://schoolconf.com/pdf/2/1726.pdf> (дата обращения: 14.12.2022). – Текст: электронный.
4. Маглакелидзе, Д. Г. Компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия аминокислот и силикат-аниона / Д. Г. Маглакелидзе // Молодежь и наука. – Т. 2. – Нижний Тагил, 2022. – 2022. – С. 332–334.
5. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. – 3-е изд., испр. (эл.). – Электрон. текстовые дан. (1 файл pdf : 522 с.). – Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014.