

полнении опытов ампулы разбивали в калориметрической камере, заполненной хлороформом, и измеряли тепловой эффект растворения.

Используя термохимический цикл, были рассчитаны значения энтальпии смешения в системе БМК-5/Ni во всем диапазоне содержания наполнителя для различных магнитных полей.

В области степеней наполнения до 60% магнитное поле значительно влияет на взаимное расположение частиц никеля в композите, что отражается на величине энтальпии смешения. Данная величина принимает отрицательные значения как в отсутствии магнитного поля, так в полях порядка 400 Э. Однако в малых магнитных полях (порядка 100 Э) энтальпия смешения больше нуля. В области более высоких степеней наполнения энтальпия смешения отрицательна и не зависит от величины магнитного поля.

Работа выполнялась при финансовой поддержке проектов фундаментальных исследований УрО РАН и гранта УрО РАН – CRDF RUE2-7103-EK-13.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА АГРЕГАЦИИ ИНГИБИТОРА ХЛОРИДА ТЕТРААЛКИЛАММОНИЯ В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Жижина М.С., Ширококов И.Б.

Удмуртский государственный университет
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, д. 1

В современной жизни применение мицеллярных растворов достаточно широко. Для проведения исследований на молекулярном уровне, получения подробной информации о структуре и термодинамических характеристиках ассоциатов, процессе агрегации в растворах используются методы молекулярного моделирования.

В качестве объектов исследования были выбраны ингибиторы кислотной коррозии хлориды тетраметиламмония (ТМА) и тетраэтиламмония (ТЭА) и исследован процесс их агрегации в полярном (вода) и неполярном (циклогексан) растворителях.

Основные молекулярно-динамические расчеты выполнялись методом молекулярной динамики (МД) с использованием пакета GROMACS (version 4.5.4) и силового поля GMX, модель воды SPC. Визуализацию полученных данных осуществляли с использованием программы RasWin. Файлы исходной геометрии молекул хлоридов ТМА и ТЭА были созданы с использования сервера PRODRG с последующим добавлением аниона хлора. После этого был проведен молекулярно-

динамический расчет по оптимизации геометрии молекул. Аналогично создавалась молекула циклогексана и оптимизировалась её геометрия.

Результаты МД расчёта показали, что для водных систем при постоянной температуре с увеличением разбавления числа агрегации уменьшаются. Это связано с тем, что вокруг молекулы увеличивается число молекул воды, которые играют разрыхляющую роль и препятствуют образованию аморфно-кристаллической структуры. Так же можно заметить, что анионы выжимаются в отдельное облако. В неполярном растворителе не образуются отдельных кластеров, т.к. циклогексан препятствует процессу агрегации вследствие экранирования кулоновского взаимодействия между ионами.

Можно отметить, что при разных температурах и при соотношении молекул хлорида ТЭА и молекул воды 1:50 соответственно числа агрегации имеют приблизительно одинаковое значение. По графикам функции радиального распределения можно сказать, что в этом случае образуется кристаллически подобная структура. Для остальных систем такого не наблюдается, и при постоянной температуре с увеличением разбавления числа агрегации уменьшаются. Это так же связано с разрыхляющей ролью молекул воды. Для хлорида ТЭА в неполярном растворителе так же не характерно образование отдельных ассоциатов. В этом случае циклогексан ещё в большей степени препятствует процессу агрегации.

Сравнивая эти два ингибитора, можно заметить, что на процесс агрегации оказывает влияние природа растворителя. Полярный растворитель способствует процессу агрегации, а неполярный затрудняет его, при этом, чем более разветвлённый скелет имеет вещество, тем в большей степени происходит затруднение.

По результатам расчётов для водных систем были найдены числа агрегации, что позволило оценить изменение термодинамических параметров (энтальпии, энтропии, энергии Гиббса) моделируемых систем в процессе агрегатирования.