

УДК 620.197

ОЦЕНКА РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗОПРОПАНОЛЬНОГО ОТХОДОВ ПЕРЕРАБОТКИ ВИНОГРАДА НА ОСНОВЕ КАНТОВО – ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

В.И. Воробьева к.т.н., И.Н. Трус, к.т.н., Скиба М.И. к.т.н.
Научный руководитель: Е.Э. Чигиринец, д.т.н., профессор.
Национальный технический университет Украины «Киевский
политехнический институт»
г. Киев

Для защиты от атмосферной коррозии применяются ингибиторы коррозии, способные защищать изделия сложной формы из различных металлов [1]. На основе исследований перечня растительных материалов авторами работы было установлено [2], что экстрактивные соединения шрота рапса, шишек хмеля, травы полыни, скорлупы грецкого ореха обладают ингибирующими свойствами. Поэтому растительное сырье может быть успешно применено при разработке новых летучих ингибиторов коррозии как альтернатива ЛИАК на основе синтезированных органических соединений.

Одним из видов растительного сырья, являются отходы переработки винограда. Исследование состава изопропанольного экстракта гребней винограда показало, что в нем содержится комплекс органических соединений. Среди основных компонентов отмечено высокое содержание терпеновых соединений и альдегидов. Однако остается невыясненным основные действующие соединения экстрактивной части гребней винограда. Были изучены молекулярные структуры терпеновые соединения – нерол и линалоол. Несмотря на успехи, достигнутые в разработке общей теории ингибирования коррозии процесс целенаправленного синтеза ингибитора, за счет теоретического прогнозирования адсорбционной способности остается не достаточно изученным. Прогресса можно достичь моделированием адсорбции молекул ингибиторов на поверхности металла для объяснения их действия на процессы электрохимической коррозии. Используя вычислительные методы квантовой химии, можно получить информацию на уровне электронного строения молекул и атомов, структурную и энергетические характеристики. В качестве объекта исследования было рассмотрено терпеновые соединения – линалоола и нерола. Квантово-химические расчеты молекулярных диаграмм проводили по программе *HyperChem Version Professional Release 6.03*. Энергетические характеристики молекулы представлены в табл. 1.

Поэтому целью работы является проведение квантово – химической оценки реакционной способности основных компонентов растительного сырья. Реакционную способность органических соединений проводили на основе энергетических характеристик молекул, полученных с помощью

квантово-химических расчетов методом молекулярной механики, MNDO на базе MM2, по программе HyperChem 8.0.

Таблица 1. Энергетические параметры молекул 3,5-диметокси-4-гидроксибензальдегида на основе квантово-химических расчетов

| Молекула | $E_{ВЗМО}$ (eV) | $E_{НВМО}$ (eV) | $\Delta\varepsilon_{(B-H)}$ (eV) | ω |
|----------|-----------------|-----------------|----------------------------------|----------|
| Нерол | -9,694 | 0,515 | 10,20 | 1,14 |
| Линалоол | -8,227 | -0,283 | 7,944 | 1,06 |

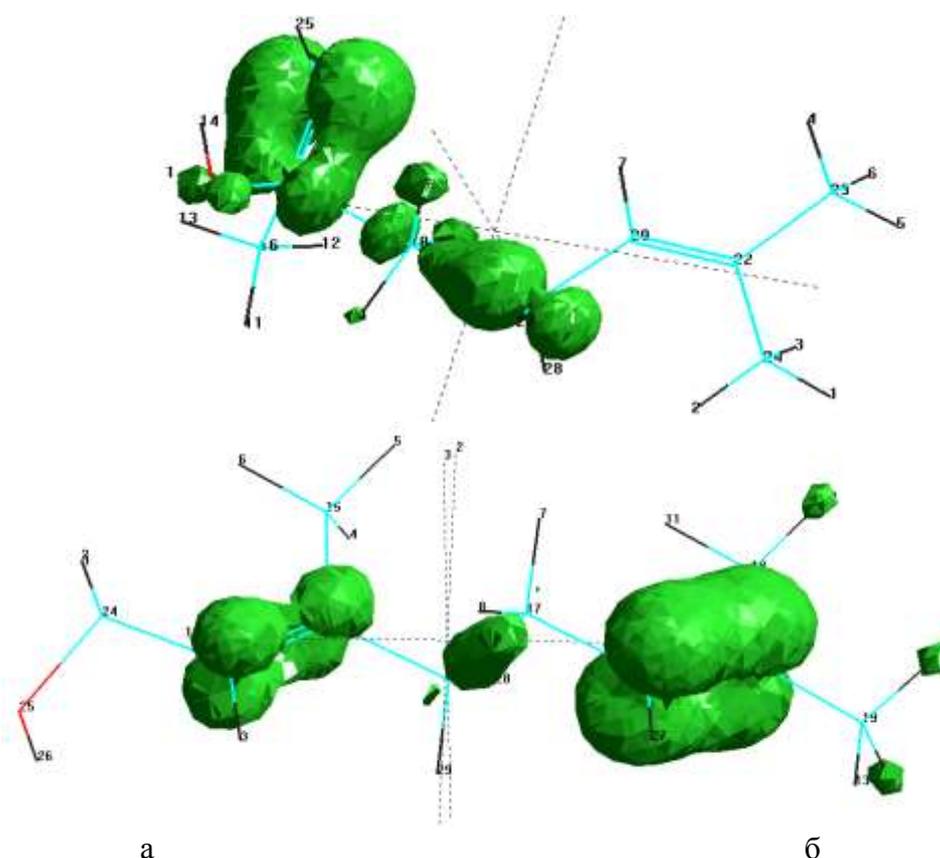


Рис. 1. Графическое распределение энергии ВЗМО, по данным квантово-химических расчетов

Полученные результаты свидетельствуют, что все рассмотренные молекулы имеют низкие значения электрофильности (ω), а следовательно выступают в качестве нуклеофилов. Рассчитанные параметры свидетельствуют, что для линалоола размещение волновой функции совпадает с отрицательным значением заряда на атоме кислорода, что повышает адсорбционную способность молекулы. Волновая функция для нерола размещена на атомах $C = C$ связи, указывает на большую адсорбции именно

по этим атомам. Адсорбционная способность молекулы линалоола повышена за счет возможности адсорбции по донорно-акцепторному механизму ОН группы, и π связи группы C=C.

Список литературы

1. Chyhyrynets' O.E., Vorob'iova V.I. Anticorrosion Properties of the Extract of Rapeseed Oil Cake as a Volatile Inhibitor of the Atmospheric Corrosion of Steel // *Materials Science*. – 2013. – Vol. 49. – № 3. – pp. 318–325.
2. Vorobyova V, Chygyrynets' O. Evaluation of various plant extracts as vapor phase corrosion inhibitor for mild steel // *British Journal of Science, Education and Culture*. – 2014. – №. 2 (6). – pp. 43–49.