

УДК 620.197

ОЦЕНКА И РАСЧЕТ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ КАНТОВО – ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

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

Несмотря на успехи, достигнутые в разработке общей теории ингибирования коррозии процесс целенаправленного синтеза ингибитора, за счет теоретического прогнозирования адсорбционной способности остается недостаточно изученным. К настоящему времени накоплен большой опыт квантово-химических расчетов, адсорбционной способности органических соединений на поверхности металлов, с целью прогнозной оценки их ингибирующей эффективности. При этом защитная эффективность органических соединений можно также оценить по электронным характеристикам исследуемых структур.

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. Поэтому в работе проведены расчеты энергетических параметров молекулы для прогнозирования адсорбционной способности, а как следствие и ингибирующей эффективности. Энергетические характеристики молекулы представлены в табл. 1.

Поэтому целью работы является проведение квантово – химической оценки реакционной способности терпеновых соединений. 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.

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.

Таблица 1.

Энергетические параметры молекул на основе квантово-химических расчетов

Молекула	$E_{\text{ВЗМО}}$ (eV)	$E_{\text{НВМО}}$ (eV)	$\Delta\epsilon$ (В-Н) (eV)	ω
Нерол	-9,694	0,515	10,20	1,14
Линалоол	-8,227	-0,283	7,944	1,06

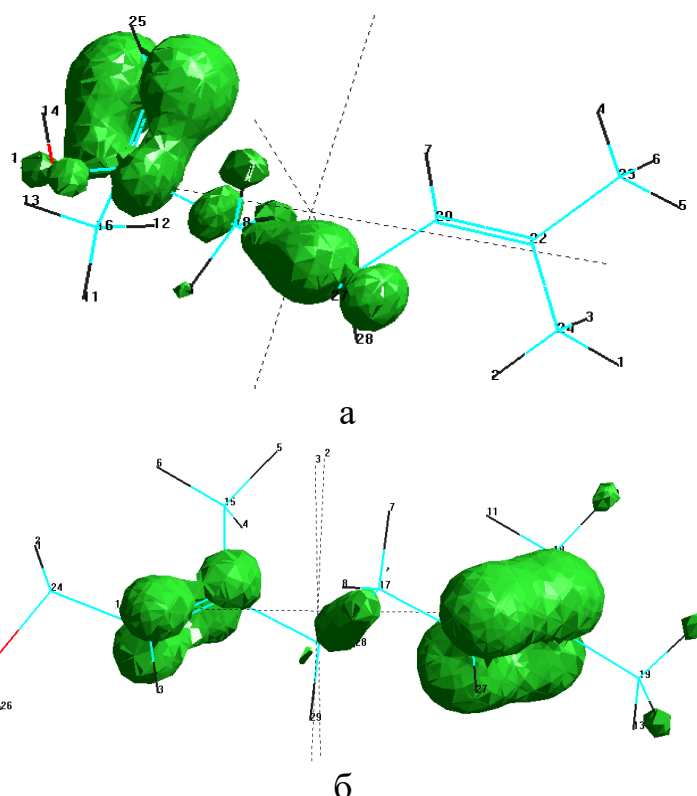


Рис. 1. Графическое распределение энергии ВЗМО, по данным квантово-химических расчетов

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 OH 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.