КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЕНЕРГЕТИКИ ІОННОЇ АСОЦІАЦІЇ «БАРВНИК – БАРВНИК»

Пономарьов В. К., Шаповалов С. А.
Харківський національній університет імені В. Н. Каразіна, Харків, Україна
vad.ponomarov@gmail.com

Останнім часом все більшого застосування набувають методи молекулярного моделювання, а саме використання комп'ютерів для прогнозування властивостей хімічних систем. Нами вже було досліджено енергетику іонної асоціації для систем «мономер іонної поверхнево-активної речовини (ПАР) – барвник» для катіонного цетилпіридиній броміду та барвників етилеозину та родаміну 200 С [1], [2].

В даній роботі було проведено моделювання енергетики процесу асоціації для систем «барвник – барвник». Досліджено барвники: етилеозин (тип заряду: -1), родамін 200 С (тип заряду: -1) та пінаціанол (тип заряду: +1). Була розрахована енергетика процесу – стандартна ентальпія утворення (ΔH^0) та встановлено найбільш термодинамічно вигідну структуру асоціату. Моделювання проводилось в програмному пакеті HyperChem, оптимізація геометрії – методом молекулярної механіки ММ+, термодинамічні розрахунку – за алгоритмом SinglePoint напівемпіричними методами АМ 1 та РМ 3 у вакуумі.

Асоціація «аніонний барвник – катіонний барвник» досліджувалась для систем «етилеозин – пінаціанол» та «родамін 200 С – пінаціанол». Отримані дані щодо такої взаємодії показують, що така асоціація є термодинамічно вигідною для обох систем, стандартні ентальпії утворення асоціатів значно вищі нуля та перевищують похибку розрахунків даними методами – 6 ккал/моль (таблиця 1) для обох напівемпіричних методів. Найбільший виграш в стандартних ентальпіях ($\Delta(\Delta H^0) = \Delta H^0$ (асоціат) – ΔH^0 (молекул)) досягнуто для структур, що позначені напівжирним текстом.

Таблиця 1. Енергетика системи «етилеозин – пінаціанол»

d, Å	Енергетичні характеристики, kcal/mol			
	АМ 1		РМ 3	
	ΔH^0	$\Delta(\Delta H^0)$	ΔH^0	$\Delta(\Delta H^0)$
4,7	**306**	**207**	**257**	**161**
8,4	463	50	378	40
7,3	439	74	374	44
6,9	453	60	384	34
7,4	439	74	374	44
10,9	**273**	**240**	**375**	**43**

Таблиця 2. Енергетика системи «родамін 200 С – пінаціанол»

d, Å	Енергетичні характеристики, kcal/mol			
	АМ 1		РМ 3	
	ΔH^0	$\Delta(\Delta H^0)$	ΔH^0	$\Delta(\Delta H^0)$
6,3	243	45	176	47
4,9	**216**	**72**	**152**	**71**
5,8	236	52	172	51
8,0	263	25	198	25
5,9	252	36	184	39
4,5	234	54	166	57

де d – дистанція між зарядженим атомом Нітрогену пінаціанолу та зарядженим атомом Оксигену (для етилеозину) або зарядженим атомом Оксигену найближчої сульфогрупи (для родаміну 200 С).

[1] Пономарьов В. К., Шаповалов С. А. Асоціація іонів барвників з поверхнево-активними речовинами у розчинах // II Всеукр. наук. конф-я «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи. – 2018. – С. 171 – 174.

[2] Shapovalov S.A., Ponomariov V.K. Spectral manifestation of the participation of dyes in interphase phenomena: instrumental determination of critical micelle concentration of ionic surfactants // XVI Polish — Ukrainian Symposium on Theoretical and Experimental Studies of Interface Phenomena and their Technological Applications. – 2018. – P. 140.