

ЕНЕРГЕТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АСОЦІАТІВ БАРВНИКІВ З ІОННИМИ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИМИ РЕЧОВИНАМИ

Шаповалов С. А., *Мошаренкова О. В.*

Харківський національний університет ім. В. Н. Каразіна, Харків, Україна

serghey.a.shapovalov@karazin.ua

Вивчення асоційованих наночастинок на основі барвників і функціоналізованих речовин набуває плідного розвитку. Інтенсивно досліджуються наносистеми «барвник + поверхнево-активна речовина (ПАР)», що цікавить провідні галузі хімії, біології, біофізики [1], у тому числі для кількісного визначення екотоксикантів (ПАР, металів) у різних середовищах або для вирішення низки практичних фізико-хімічних завдань (визначення критичної концентрації міцелоутворення) [2].

Для опису досить складних багатоатомних молекул останнім часом все більше використовуються комп'ютерні методи. У даній роботі проведено комп'ютерне моделювання взаємодій ціанінового барвника – пінаціанолу (ПНЦ) з катіонами цетилпіридиній броміду (ЦПБ) і аніонами додецилсульфату натрію (ДСН). Моделювання здійснювалося за допомогою методів: молекулярно-механічного ММ+ (оптимізація геометрії молекул) та напівемпіричних AM1 та PM3 (розрахунки стандартної ентальпії утворення сполуки) у програмному пакеті HyperChem 8.0. Особливості використання напівемпіричних методів полягає у тому, що розрахунки стосуються валентних електронів, використовуються не оптимізовані базисні функції електронних орбіталей та експериментально отримані параметри (параметризація). Основною відмінністю методу PM3 є те, що його параметри отримані для більшої кількості експериментальних даних.

Сполука	Ентальпія, ккал/моль	
	AM1	PM3
ПНЦ	412	372
ДСН	147	98
ЦПБ	124	137
ПНЦ+ДСН	559	470
ПНЦ+ЦПБ	536	509
ПНЦ·ДСН	186	156
ПНЦ·ЦПБ	357	279

У таблиці представлені результати моделювання для катіону ПНЦ та іонів ПАР, а також для асоціатів ПНЦ·ДСН та ПНЦ·ЦПБ. Дані ПНЦ+ПАР є алгебраїчною сумою відповідних стандартних ентальпій утворення відповідних іонів.

З даних таблиці випливає, що виграш енергії, ккал/моль, становить: для асоціата ПНЦ з ДСН: $559-186 = 373$ (AM1), $470-156 = 314$ (PM3) а для асоціату ЦПБ: 179 (AM1), 230 (PM3). Таким чином, результати свідчать, по-перше, про взаємну

узгодженість розрахунків різними методами і, по-друге, про досить інтенсивну взаємодію барвника з іонними ПАР. На підставі отриманих даних, також можна зробити висновок, що утворення асоціатів барвників з іонними ПАР є більш термодинамічно вигіднішим порівняно з неіонними ПАР. Такий характер енергетики спостерігався не тільки для вище наведених систем, а і для подібних систем з іншим барвником – етилеозином [3].

1. Shapovalov S.A. Association Processes with the Participation of Dyes in Solutions: Thermodynamic and Equilibrium Characteristics of Nanosystems. – Riga : Academic Publishing of European Union, OmniScriptum Publishing group, 2020. – 114 p.

2. Shapovalov S. Interaction of Dyes with Cationic Surfactants in Solutions: Determination of Critical Micelle Concentration / S. Shapovalov, V. Ponomariov // Int. Lett. Chem., Phys. Astronomy. – 2019. – Vol. 81. – P. 27 – 34.

3. Shapovalov S., Ponomariov V. The “Xanthene Dye – Surfactant” Interactions: Energy and Structures of Nanoassociates / S. Shapovalov, V. Ponomariov // AASCIT J. Nanosci. – 2019. – Vol. 5 – P. 1 – 6.