

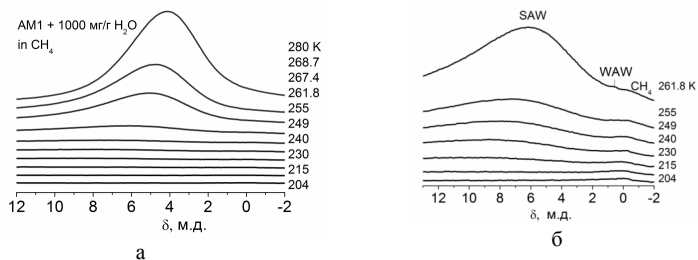
ГИДРАТАЦИЯ ГИДРОФОБНОГО КРЕМНЕЗЕМА

Елагина Н. В., Крупская Т. В., Туров В. В.Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины, Украина
natalia.yelahina@gmail.com

Вода относится к сильно структурированным жидкостям и в межчастичных зазорах метилкремнезема может взаимодействовать с его поверхностью лишь по механизмам гидрофобной гидратации, в основе которой лежат ван-дер-ваальсовы взаимодействия, поскольку на поверхности практически отсутствуют группы, с которыми молекулы воды могут формировать водородносвязанные комплексы. Благодаря склонности молекул воды к формированию пространственно упорядоченной сетки водородных связей, даже в гидрофобном окружении она может находиться в кластеризованном состоянии, которое зависит от морфологии межчастичных зазоров метилкремнезема.

Поэтому целью настоящей работы было изучение влияния гидрофобной поверхности на изменение свободной энергии воды в процессе ее внедрения в межчастичные зазоры при механической нагрузке. В качестве метода измерения энергии связывания воды с гидрофобным метилкремнеземом, использовали низкотемпературную ^1H ЯМР-спектроскопию. Изучение связывания воды с поверхностью метилкремнезема проводили в среде метана, который использовался в качестве стандарта химического сдвига ($\delta_{\text{H}}(\text{CH}_4) = 0$ м.д.)

Показано, что химический сдвиг воды, адсорбированной в гидрофобном окружении частиц метилкремнезема, увеличивается от $\delta_{\text{H}} = 4$ м.д. при $T = 280$ К до $\delta_{\text{H}} = 7$ м.д. при $T = 215$ К. Отсюда следует, что практически вся адсорбированная вода находится в сильноассоциированном состоянии, причем ассоциированность воды лишь немного меньше, чем для жидкой воды. Вблизи $\delta_{\text{H}} = 0$ м.д. в спектрах фиксируется слабый сигнал адсорбированного метана, а при $\delta_{\text{H}} = 1.5$ м.д. — сигнал слабоассоциированной воды. Следует отметить, что ввиду близости химических сдвигов WAW и метана, последний может маскировать присутствие WAW при низких температурах, когда можно ожидать максимальной величины адсорбции метана.



Снятые при разных температурах спектры ^1H ЯМР воды, адсорбированной в межчастичных зазорах метилкремнезема (а, б)

Таким образом, адсорбированная гидрофобным кремнеземом вода имеет максимальную межфазную энергию и находится в кластеризованном состоянии, причем радиус кластеров не превышает 10 нм. Вероятно, рост величины межфазной энергии в процессе создания композита метилкремнезем/вода под воздействием высоких механических нагрузок, обусловлено переводом воды из объемного в кластеризованное состояние.