

Таким чином, за механічною міцністю у площині шарів, ізомер NCNC є міцнішим більшості матеріалів і практично не поступається графену, для якого це значення є близьким до 1 ТПа [5]. Водночас завдяки шаруватій природі, міцність у напрямку $\{001\}$ є незначною, що нагадує графіт. Тому, важливим є проведення подальших розрахунків для оцінки енергії відшаровування та порівняння її з графітом. Це очевидно можливо при оцінці енергії міжмолекулярних взаємодій, що можна реалізувати за допомогою QTAİM-аналізу асиметричної комірки та визначення енергії міжшарових зв'язків за формулою Еспінози [6].

Список використаних джерел:

1. High Energy Density Materials, Structure and Bonding / T. M. Klapötke (Ed.). – Berlin: Springer, 2007. – 286 p.
2. Polymerization of nitrogen in sodium azide / M. I. Eremets, M. Yu. Popov, I. A. Trojan [et al.] // J. Chem. Phys. – 2004. – Vol. 120. – P. 10618-10623.
3. Materials Studio (Version 7.0) [Електронний ресурс] / Accelrys, Inc., San Diego, CA, 2013. – Режим доступу до програми: <http://www.accelrys.com/>.
4. Nye J. F. Physical properties of crystals / J. F. Nye. – Oxford: Oxford University Press Inc., 1985. – 329 p.
5. Liu F. Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension / F. Liu, P. Ming, J. Li // Phys. Rev. B – 2007. – Vol. 76, № 6. – P. 064120.
6. Espinosa E. Hydrogen bond strengths revealed by topological analyses of experimentally observed electron densities / E. Espinosa, E. Molins, C. Lecomte // Chem. Phys. Lett. – 1998. – 285, № 3-4. – P. 170-173.

Рублева Е.Д.

*кандидат химических наук,
научный сотрудник НИИ Гальванохимии;*

Банник Н.Г.

*кандидат технических наук, доцент,
Украинский государственный химико-технологический университет*

АДСОРБЦИОННЫЕ И ИНГИБИТОРНЫЕ СВОЙСТВА ФОСФОНОМЕТИЛИРОВАННОГО ПОЛИГЕКСАМЕТИЛЕНГУАНИДИНА В ПРИСУТСТВИИ Zn^{2+} -ИОНОВ ПРИ КОРРОЗИИ НИЗКОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ В НЕЙТРАЛЬНОЙ СРЕДЕ

В системах оборотного водоснабжения в качестве конструкционного материала широко применяют низкоуглеродистую сталь, которая может подвергаться коррозии и солеотложению, что в конечном итоге приводит к снижению эффективности работы оборудования и выходу его из строя. Для повышения эксплуатационных свойств низкоуглеродистой стали и снижения коррозионных разрушений рекомендуется применение органических

ингибиторов коррозии и солеотложения. В водных растворах в качестве таких ингибиторов широко применяются фосфорсодержащие органические вещества, что обусловлено их низкой токсичностью и высокой стабильностью, а в присутствии солей цинка ингибирующее действие фосфонатов может изменяться. Целью данной работы является исследование адсорбционных и ингибиторных свойств модифицированного фосфоновыми группами полигексаметиленгуанидина в присутствии ионов цинка.

Модифицированный фосфоновыми группами полигексаметиленгуанидин (ПГФ) был предоставлен кафедрой технологии органических веществ и фармацевтических препаратов УГХТУ. Комплексы ПГФ с ионами цинка получали смешиванием ПГФ и $ZnSO_4$ в мольном соотношении 1:100, что обусловлено степенью полимеризации ПГФ.

На основании полученных кулоностагическим методом значений поляризационного сопротивления были рассчитаны коэффициенты торможения скорости коррозии стали в присутствии ПГФ и его комплекса с Zn^{2+} . Кинетические данные позволили установить, что в комбинированной системе Zn^{2+} -ПГФ скорость коррозии стали снизилась в 3 раза по сравнению с исходным олигомером.

Для оценки адсорбционной способности ПГФ и Zn^{2+} -ПГФ кулоностагическим методом при стационарном потенциале стального электрода получены зависимости емкости двойного электрического слоя (ДЭС) от концентрации органических веществ в растворе. С увеличением концентрации ПГФ и Zn^{2+} -ПГФ происходило значительное уменьшение емкости ДЭС, что свидетельствует об адсорбции органических веществ на поверхности стального электрода. На основании полученных значений были рассчитаны величины степени заполнения поверхности электрода органическим адсорбатом, построены изотермы адсорбции, которые адекватно описывались уравнением изотермы Ленгмюра и получены значения свободной энергии адсорбции ($\Delta\bar{G}^0$) (табл.).

Для оценки энергии взаимодействия адсорбат/электрод ($\Delta\bar{G}_{A/Me}^0$) целесообразно воспользоваться подходом, предложенным в работе [1], в рамках которого выражение для свободной энергии адсорбции олигомеров ($\Delta\bar{G}^0$) можно записать в виде:

$$\Delta\bar{G}^0 = \Delta\bar{G}_{A/Me}^0 + \Delta\bar{G}_{A/B}^0 - \Delta\bar{G}_{P/Me}^0, \quad (1)$$

где $\Delta\bar{G}_{A/B}^0$ – энергия взаимодействия органического адсорбата с растворителем, которая примерно соответствует свободной энергии адсорбции ПАВ на границе раствор/воздух; $\Delta\bar{G}_{A/Me}^0$, $\Delta\bar{G}_{P/Me}^0$ – энергии взаимодействия адсорбата и растворителя с металлом, соответственно.

Расчет всех составляющих свободной энергии Гиббса по уравнению (1) возможен при наличии адсорбционных данных олигомеров на границе раствор/воздух. Для этого методом Вильгельми были получены зависимости поверхностного натяжения от концентрации производных ПГФ, построены

ізотерми адсорбції на границі розчин / повітря, які описувалися рівнянням Ленгмюра і розраховані адсорбційні характеристики. З урахуванням величини взаємодії розчинника з поверхню сталі, яка становила $-57,8$ кДж/моль [2] і $\Delta\bar{G}_{A/B}^0$, з рівняння (1) отримані значення енергії взаємодії адсорбата ($\Delta\bar{G}_{A/Me}^0$) з поверхню електрода (табл.).

Таблиця 1

Параметри адсорбції ПГФ і Zn^{2+} ПГФ на сталевому електроді

Параметр	Полиелектроліт	
	ПГФ	Zn^{2+} ПГФ
C_d , мкФ/см ²	5,0	11,6
$B \cdot 10^{-3}$, м ³ /моль	2,3	4,2
$-\Delta\bar{G}^0$, кДж/моль	45,7	46,9
$-\Delta\bar{G}_{A/Me}^0$, кДж/моль	63,0	58,6
$-\Delta\bar{G}_{A/B}^0$, кДж/моль	41,2	46,2

Таким чином, основний внесок в зміну вільної енергії адсорбції вносить взаємодія полімерів з розчинником. Утворення цинкового комплексу ПГФ призводить до збільшення константи адсорбційного рівноваги, що пов'язано з збільшенням гідрофобності і виталкуванням макромолекул розчинником на поверхню розділу фаз, що призводить до посилення інгібувальних властивостей ПГФ.

Список використаних джерел:

1. Електродні процеси в розчинах органічних сполук / Б. Б. Дамаскин, Л. Н. Некрасов, О. А. Петрий і др. – М.: МГУ, 1985. – 312 с.
2. Афанасьев Б. Н., Акулова Ю. П., Яковлева О. Р. Влияние природы металла на адсорбцию поверхностно-активных веществ из водных растворов // Защита металлов. – 2001. – 37, № 3. – С. 229–237.

Юзвенко Ю.В., Смоляк В.Г., Балушок М.Ю.

студенти,

Національний авіаційний університет

ОТРИМАННЯ ЕТАНОЛОВИСТНОГО ПАЛИВА Е30

Виготовлення біоетанольного палива за проведеною нижче технологією – процес екологічно чистий та є повністю безвідходним.

Розроблена технологічна лінія працює на альтернативному виді енергії, що дозволяє значно економити енергоресурси. Крім того, ще й має змогу в деякій мірі утилізувати органічні відходи.