

УДК 541.183

Ю.И. Тарасевич, Е.В. Аксененко

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОЛЕКУЛ ВОДЫ С ГИДРОФИЛЬНЫМИ И ГИДРОФОБНЫМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ

Институт коллоидной химии и химии воды
им. А.В. Думанского НАН Украины, г. Киев
yuitaras@ukr.net

Рассмотрена гидрофобность базальной поверхности талька и гидрофильность поверхности силикагеля. Выполнены ab initio расчеты энергетики и геометрии микрокластеров, образуемых молекулами воды на активных центрах идеальной базальной поверхности талька и поверхности силикагеля. Показано, что типичным свойством гидрофобной поверхности является адсорбция единичных молекул на слабых центрах (атомах кислорода силоксановой группы) поверхности талька, которые затем служат вторичными центрами адсорбции молекул воды. В то же время адсорбция воды на сильных активных центрах (вицинальных парах) поверхности силикагеля приводит к образованию кластера, подобного по своей структуре жидкой воде. В соответствии с этим адсорбционный слой вблизи гидрофобной поверхности является обедненным, а вблизи гидрофильной поверхности – обогащенным молекулами адсорбата.

Ключевые слова: активные центры, гидрофобность, гидрофильность, поверхность, силикагель, тальк.

Введение. Изучение зависимости взаимодействия молекул воды с коллоидными частицами от гидрофильности или гидрофобности поверхности этих частиц является одним из основных направлений современной коллоидной химии [1, 2], а также химии, физики и биологии воды [3, 4].

Фактором, определяющим успех работ, выполняемых современными методами, в первую очередь является правильный выбор исследуемых гидрофильных и гидрофобных матриц, с детальным обсужде-

© Ю.И. Тарасевич, Е.В. Аксененко, 2015

кисню силоксанової групи) поверхні тальку, які потім діють як вторинні центри адсорбції молекул води. В той же час адсорбція води на сильних активних центрах (віцинальних парах) поверхні силікагелю призводить до утворення кластера, подібного по своїй структурі до рідкої води. Відповідно до цього, адсорбційний шар поблизу гідрофобної поверхні є збідненим, а поблизу гідрофільної поверхні – збагаченим молекулами адсорбату.

Yu.I. Tarasevich, E.V. Aksenenko

INTERACTION OF WATER MOLECULES WITH HYDROPHILIC AND HYDROPHOBIC SURFACES OF COLLOID PARTICLE

Summary

The hydrophobicity of the talc basal surface and the hydrophilicity of silica gel surface is considered. The *ab initio* calculations of the energetics and geometry of the microclusters formed by water molecules adsorbed on the active centres located at the perfect basal surface of talc and the silica gel surface are performed. It is shown that the typical property of the hydrophobic surface is the adsorption of single molecules on weak active centres (oxygen atoms of silanol group) of the talc surface, which act as secondary adsorption centres, and subsequent adsorption of water molecules thereon. At the same time, the adsorption of water on strong active centres (vicinal pairs) of the silica gel surface results in the formation of the cluster with the structure similar to that of liquid water. Correspondingly, the adsorption layer in the vicinity of the hydrophobic surface is depleted, while in the vicinity of the hydrophilic surface is enriched with the adsorbate molecules.

Список использованной литературы

- [1] Фролов Ю.Г. Курс коллоидной химии. – М.: Химия, 1988. – 464 с.
- [2] Adamson A.W., Gast A.P. Physical Chemistry of Surfaces. – New York: Wiley, 1997. – 784 p.
- [3] Гунько В.М., Туров В.В., Горбик П.П. Вода на межфазной границе. – К.: Наук. думка, 2009. – 694 с.
- [4] Гончарук В.В. Наука о воде. – К.: Наук. думка, 2010. – 511 с.

- [5] *Michot L., Villieras F., Francois M., Yvon J., Le Dred R., Cases J.M.* // *Langmuir*. – 1994. – **10**, N 10. – P. 3765–3773.
- [6] *Malandrini H., Clauss F., Partyka S., Douillard J.M.* // *J. Colloid. Interface Sci.* – 1997. – **194**, N 1. – P. 183–193.
- [7] *Тарасевич Ю.И.* Поверхностные явления на дисперсных материалах. – К.: Наук. думка, 2011.
- [8] *Тарасевич Ю.И., Поляков В.Е., Сердан А.А., Лисичкин Г.В.* // *Коллоид. журн.* – 2005. – **67**, № 5. – С. 702–708
- [9] *Тарасевич Ю.И.* // *Укр. хим. журн.* – 2013. – **79**, № 11. – С. 42–49.
- [10] *Ferrage E., Seine G., Gaillot A.- C., Petit S., de Parseval P., Boudet A., Lanson B., Ferret J., Martin F.* // *Eur. J. Mineral.* – 2006.– **18**, N 4. – P. 483–491.
- [11] *Granovsky A.A.* // Firefly version 7.1.G. – Режим доступа: <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
- [12] *Вартапетян Р.Ш., Волощук А.М.* // *Успехи химии.* – 1995. – **64**, № 11. – С. 1055–1072.
- [13] *Wang J., Kalinichev A.G, Kirkpatrick R.J.* // *J.Phys. Chem., C.* – 2009. – **113**, N25. – P. 11077–11085
- [14] *Lee C.W., Min B.J., Kim S.I., Jeonj H.K.* // *Carbon.* – **54**, N 1. – P. 353–358.
- [15] *Думанский А.В.* Лиофильность дисперсных систем.– К.: Изд-во АН УССР, 1960. – 212 с.

Поступила в редакцию 17.07.2014 г.