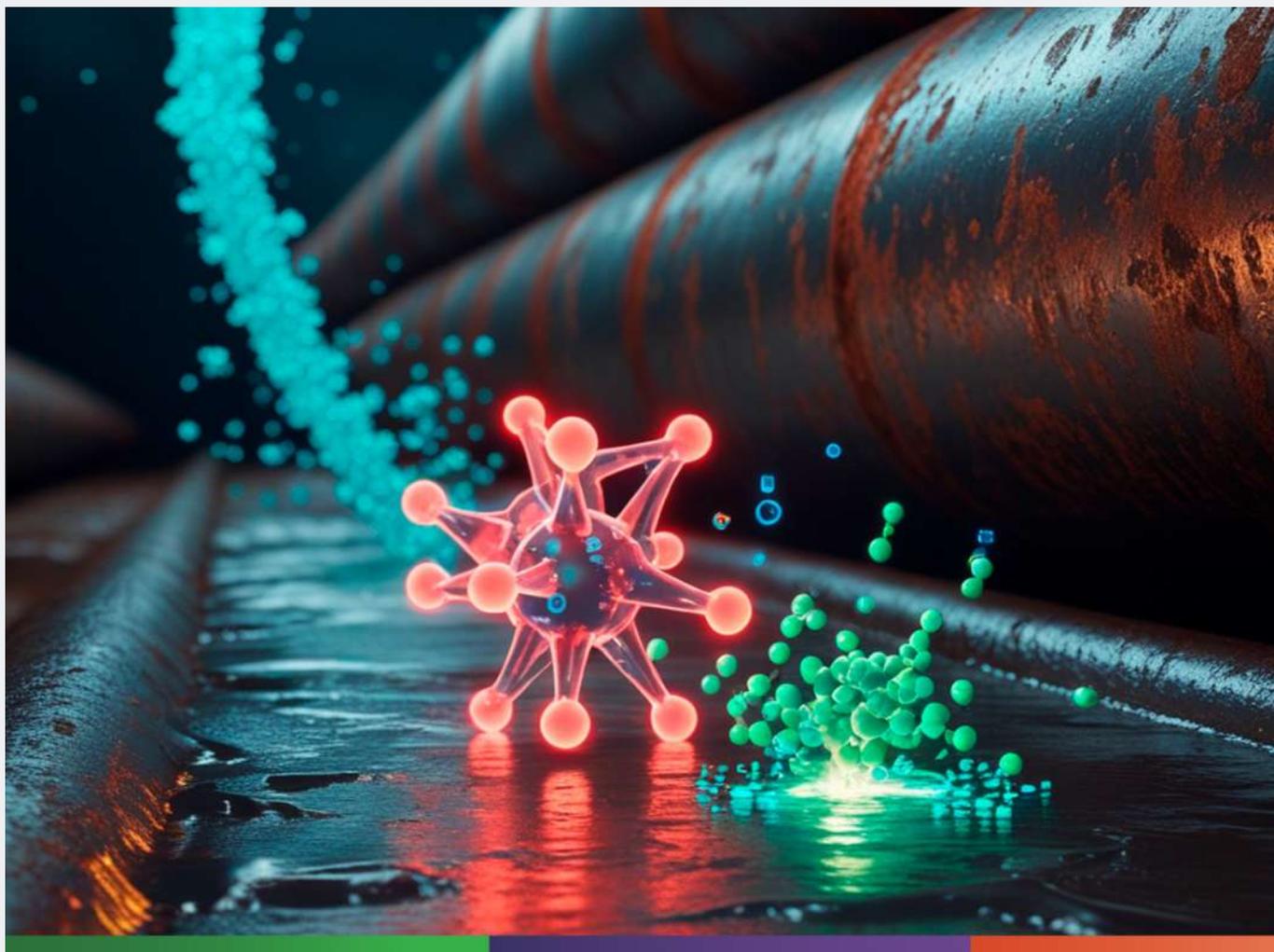


Известный антисептик борется с агрессивными солями



На нефте- и газопроводы постоянно воздействуют агрессивные вещества: хлориды, кислоты, растворенный в воде углекислый газ. Металл разрушается, оборудование выходит из строя, компании теряют миллиарды. Один из способов защиты — ингибиторы коррозии, вещества, которые замедляют разрушение металла. Но чтобы они работали эффективно, нужно точно понимать, как они взаимодействуют с «агрессорами» на молекулярном уровне.

В журнале *Journal of Molecular Liquids* (квартиль Q1) вышла статья международного научного коллектива, в который вошла доцент Высшей школы высоковольтной энергетики СПбПУ Надежда Андреева. Работа посвящена изучению механизма связывания коррозионно-активных веществ с использованием бензалкония хлорида — известного антисептика.

Бензалкония хлорид знаком многими как дезинфицирующее средство. В борьбе с коррозией он ведет себя двойственно: в небольших дозах защищает металл, в высоких — ускоряет его разрушение. Чтобы разобраться в механизме, исследователи провели серию компьютерных экспериментов. С помощью методов квантовой химии (теории функционала плотности) они смоделировали поведение молекулы БАХ в компании с шестью основными «врагами» металлов: хлоридами железа, натрия и кальция, уксусной кислотой, бикарбонатом натрия и углекислым газом.

Расчеты показали: ингибитор действует избирательно. Лучше всего он связывается с хлоридом железа (II). Энергия Гиббса, показывающая самопроизвольность процесса, составила $-18,88$ кДж/моль — отрицательное значение говорит о том, что реакция идет охотно и с выделением энергии. Молекула БАХ захватывает ионы железа благодаря своему ароматическому кольцу: между ними возникает прочная п-связь.

С хлоридом натрия и бикарбонатом натрия связь оказалась слабее (положительные значения энергии Гиббса $+14,39$ и $+22,21$ кДж/моль соответственно), а углекислый газ и уксусная кислота и вовсе взаимодействуют с ингибитором плохо. С хлоридом кальция реакция и вовсе энергетически невыгодна ($\Delta G = +62,50$ кДж/моль). Ионы кальция слишком сильно поляризуют ароматическое кольцо, и молекулы скорее отталкиваются, чем притягиваются.

Оригинал статьи: [REDACTED]

