

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ
РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ РАН

УСПЕХИ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Сборник тезисов докладов на
Всероссийской молодежной конференции



ЧЕРНОГОЛОВКА
21 – 23 июня 2011 года

КИНЕТИКА СВЕРХВЫСКОЙ
ФОТОИНДУЦИРОВАННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ
ЗАРЯДОВ В ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫХ
КОМПЛЕКСАХ В ПОЛЯРНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

* Юданов В.В., Иванов А.И., Милэйлова В.А.
ВолГУ, Волгоград, Россия
* yudalov-volsu@yandex.ru

В рамках многоканальной стохастической модели [1, 2] исследовано влияние полярности растворителей на кинетику сверхбыстрой рекомбинации зарядов в возбужденных донорно-акцепторных комплексах (ДАК). Основными энергетическими параметрами этой модели являются: свободная энергия рекомбинации зарядов ΔG , энергии рекомбинации среды $E_{\text{тн}}$ и внутримолекулярных колебательных степеней свободы $E_{\text{тв}}$. Данные параметры были определены из фитинга экспериментальных данных для стационарного спектра полосы поглощения с переносом заряда. Частоты внутримолекулярных квантовых мод и их параметры Хуанга-Риса S_{α} были получены из данных резонансного комбинационного рассеяния [1]. Исследованы ДАК: гексаметилбензол/тетрацианозтилен (TCNE), изолурен/TCNE и пентаметиленол/TCNE в следующих полярных растворителях: ацетонитрил, дихлорэтан и октанитрил. Полученные из фитинга значения величин $E_{\text{тн}}$ и ΔG сравнивались с предсказаниями простейшей континуальной теории диэлектриков. Показано, что влияние полярности среды на рассматриваемые параметры удовлетворительно описывается теорией. Проведено сравнение найденных кинетических параметров экспериментальными данными [3].

Литература

- [1] Feskov S.V., Ionkin V.N., Ivanov A.I., Hagemann H., Vauthey E. // Journal of Physical Chemistry A. 2008. V. 112. P. 594–601.
- [2] Feskov S.V., Ionkin V.N., Ivanov A.I. // Journal of Physical Chemistry A. 2006, v. 110. p. 11919–11925.
- [3] Nicolet O., Banerji N., Pages S., Vauthey E. // Journal of Physical Chemistry A. 2005. V. 109. P. 8236–8245.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ ГЕМИНАЛЬНОЕ
ВОДОРАСТВОРИМЫЙ НЕИОННЫЙ ПОЛИМЕР

Кувечич Е.И., Миргородская А.Б., Захарова Л.Я.
ФФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, Казань, Россия
* katerina.yatizkevitch@yandex.ru

Исследован механизм и анализ агрегационного поведения и физико-химических свойств гомополимеров ПАВ, содержащих полимерные цепи, привлекает особое внимание исследователей, так как они имеют высокий потенциал практического использования и в настоящее время находят применение в современных технологиях, включая производство покрытий, косметических средств, смазок, доставку лекарственных средств. В данной работе комплексно-химических методов (тензиометрия, динамическое рассеяние света, оптическая спектроскопия) количественно охарактеризованы супрамолекулярные системы на основе гомополимеров ПАВ и водорастворимых неионных полимеров. В качестве объектов исследования выбраны бромид гексаалкиленбис(пиперазин) (Гем-16), полиэтиленгликоли (с молекулярными массами 3000 и 20000 Да), блоксополимеры с различными соотношениями полиэтиленоксидных и этиленоксидных фрагментов (Pluronic F-127, Supregonic L64). Установлены критические концентрации мицеллообразования, размеры агрегатов, поверхностная энергия индивидуальных и смешанных систем. Проведено сравнительное исследование свойств, солюбилизующей способности и каталитического эффекта в процессах щелочного гидролиза эфиров карбоновых кислот. Показано, что образование смешанных агрегатов ПАВ приводит к уменьшению положительного поверхностного заряда мицеллы гомополимерного ПАВ и является одной из основных причин снижения мицеллярного каталитического эффекта в процессах гидролитического расщепления сложноэфирных связей.

¹ Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (контракт 14.740.11.0374).