

УДК 544.72:541.183+547.288

ТЕНЗИОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ОКСИМОВ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ЖИДКОСТЬ-ГАЗ

Хилько С.Л., Котенко А.А., Гребенюк С.А., Заречная О.М., Михайлов В.А.

*Институт физико-органической химии и углехимии
83114, г. Донецк, ул. Розы Люксембург, д. 70
e-mail: sv-hilko@yandex.ru*

Методами кольца Дю Нуи, формы висячей капли и максимального давления в пузырьке исследованы тензиометрические и реологические характеристики растворов дикатионного (дихлорид 1,3-бис(3'-цетилимидазолий-1'-ил)-2-оксиминопропана) и монокатионного (хлорид 1-(2'-оксиминопропил)-3-цетилимидазолия) оксимов на границе раздела жидкость – газ. Выявлена высокая поверхностная активность и высокие значения модулей вязкоупругости и упругости дикатионного оксима.

Методами ЯМР (BRUKER Avance II 400, 9.4 Тл) ^1H , ^{13}C , 2D изучено строение модельного дикатионного оксима 1,3-бис(3'-метилимидазолий-1'-ил)-2-оксиминопропана, в котором CH_3 -группы имитируют начало боковых $\text{C}_{16}\text{H}_{33}$ -цепей, в растворе D_2O . Выявлена магнитная неэквивалентность ядер водорода и углерода в имидазолийсодержащих фрагментах. Предложена модель преимущественной конформации дикатиона оксима. Квантово-химические расчеты структуры модельных оксимов, выполненные на уровне теории wB97xD/6-31+G(d,p) в состоянии идеального газа и стандартных условиях с использованием программы GAMESS(US), согласуются с данными ЯМР исследований.

На основании проведенных исследований предположено, что молекулы дикатионного оксима в силу жесткости конструкции мостикового фрагмента и развернутым углам между алкильными цепями, способны к образованию сетки межмолекулярных зацеплений, которая определяет аномально высокие значения модулей вязкоупругости и упругости поверхностных слоев и низкие значения критической концентрации мицеллообразования.