**Использование модели бимолекулярной адсорбции для описания свойств солей модифицированных гуминовых кислот**

***Рогатко М.И.1***

*Младший научный сотрудник*

*1Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко,*

*Донецк, Россия*

*E-mail: marina.rogatko@gmail.com*

Гуминовые кислоты – это сложные природные биополимеры, характерной особенностью которых является наличие большого количества функциональных групп (гидроксильных, карбоксильных, метоксильных, хиноидных), что обуславливает их необычайно высокую способность вступать в химические реакции, участвовать в окислительно-восстановительных и сорбционных процессах, что делает возможным их использование в качестве эффективных и дешевых ПАВ, антикоррозионных агентов, редокс-полимеров, сорбентов [1]. Одним из перспективных направлений является разработка механохимических методов структурного модифицирования гуминовых кислот путем введения в состав их макромолекул новых функциональных фрагментов.

Целью работы было проведение твердофазной реакции этоксилирования и аминирования гуминовых кислот с полиэтиленгликолем (ПЭГ–6000) и аминирующими реагентами (мочевина, гидроперит, циангуанидин) механохимическим способом, исследование продуктов реакции методами динамической тензиометрии, дилатационной реологии (PAT-2P (SINTERFACE Technologies, Germany)). Для описания свойств поверхностных слоев растворов солей модифицированных гуминовых кислот использовали модель бимолекулярной адсорбции, разработанную для характеристики адсорбционных свойств растворов белков. Модель учитывает возможность существования макромолекул в n состояниях с различной молярной площадью (от ωmin до ωmax) и их способность к агрегации в адсорбционных слоях. Рассчитанные теоретические параметры с помощью программы ProteinG [2] приведены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры модели полимолекулярной адсорбции для натриевых солей гуминовых кислот

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Образец | ω0∙105м2/моль | ωmin∙106м2/моль | ωmax∙106 м2/моль | ωmax/ωmin | n |
| ГНисх  | 3.0 | 2.5 | 10 | 4.0 | 26 |
| ГНГК+ПЭГ-6000  | 5.0 | 4.0 | 10 | 2.5 | 13 |
| ГНГК + мочевина | 6.76 | 3.94 | 10 | 2.45 | 17 |
| ГНГК+ циангуанидин | 5.43 | 5.44 | 10 | 1.86 | 10 |
| ГНГК+ПЭГ-6000+мочевина | 5.57 | 2.9 | 28 | 9.6 | 46 |
| ГНГК+ПЭГ-6000 +циангуанидин | 5.91 | 4.89 | 40 | 8.17 | 60 |

Согласно расчётам, вероятное количество состояний n, рассчитанное по модели бимолекулярной адсорбции, которое могут принимать макромолекулы солей этоксиаминогуминовых кислот в поверхностном слое, больше, чем для образцов ГНисх и для двухфункциональных гуматов натрия, что характерно для гибкоцепных белковых макромолекул, которые способны существенно изменять молярную площадь на межфазных границах. Кроме того, величины ωmax/ωmin для солей этоксиаминогуминовых кислот, находятся в диапазоне, близком к величине, характерной для гибкоцепного β-казеина (ωmax/ωmin = 10) [3].

**Литература**

1. Попов А.И. Гуминовые вещества: свойства, строение, образование / Под ред. Ермакова Е.И. // СПб.: Изд во С.-Петерб. ун-та. 2004.

2. Программа «ProteinG». URL: <http://www.thomascat.info/Scientific/adso/adso.htm> (дата обращения: 14.02.2024).

3. Lucassen-Reynders E.H., Fainerman V.B., Miller R. Surface Dilational Modulus or Gibbs' Elasticity of Protein Adsorption Layers // J. Phys. Chem. B. 2004. V. 108. P. 9173 9176.