

## **О связи энергии активации хемосорбции прямых красителей с топологическими характеристиками их молекул**

© Ковалева<sup>1+</sup> Элла Александровна и Доломатов<sup>1,2\*</sup> Михаил Юрьевич

<sup>1</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062.

Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (917) 406-27-06. E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

<sup>2</sup> Физико-технический Институт Башкирского государственного университета.

ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. E-mail: mdolomatov@bk.ru

\*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** прямые красители и их производные, топологические индексы, энергия активации сорбции.

### **Аннотация**

В данной статье исследована макрокинетика сорбции прямых красителей на волокнах целлюлозной ткани. Квантово-химическими расчетами, методом функционала электронной плотности B3LYP/6-31G\*\*, установлено, что в молекулярной форме эти красители непланарны. Предложен двухпараметрический топологический дескриптор, который описывает связь структуры и макрокинетических характеристик молекул красителя. Установлена взаимосвязь между энергией активации процесса сорбции красителя и топологическими характеристиками молекул, которая указывает на роль структурно-химических эффектов. При построении топологической матрицы учтено, что прямые красители являются гетероатомными соединениями. В качестве топологических характеристик рассмотрены простой индекс Винера и дисперсия хюккелевских энергий, которая отражает собственные значения топологической матрицы. Дисперсия суммы квадратов собственных значений хюккелевской матрицы характеризует флуктуации спектра энергетических состояний молекулы. Простой индекс Винера учитывает гетероатомы, но не учитывает кратные и ароматические связи. В работе предполагается, что в рядах рассматриваемых молекул энтальпийную энергетическую составляющую отражает дисперсия хюккелевских энергий, а энтропийную, структурную – индекс Винера. Показано, что существует корреляция между индексами Винера, дисперсией спектра хюккелевских энергетических состояний красителя и энергией активации сорбции прямого красителя, что свидетельствует об орбитальном контроле процесса сорбции прямых красителей в системе прямой краситель-волокно целлюлозной ткани и возможности переноса заряда от красителя к активным центрам волокна. Полученная корреляция показывает, что активационный процесс сорбции связан с преодолением стерических затруднений. Подобный подход может быть использован в органической химии для направленного синтеза больших органических молекул, содержащих гетероатомы.