

О МЕХАНИЗМАХ СОЛЬВОФОБНЫХ ЭФФЕКТОВ В РАСТВОРИТЕЛЯХ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СЕТКОЙ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ

Родникова М.Н., Чумаевский Н.А.

Институт общей и неорганической химии им. Н.С.Курнакова РАН, Москва,
E-mail: rodriikova@igic.ras.ru

Сольвофобные эффекты, проявляющиеся только в растворителях с пространственной сеткой водородных связей, весьма важны, особенно для биологических систем. Термодинамика этих явлений более менее исследована, но механизм их до сих пор неясен.

Сольвофобные эффекты состоят как бы из двух этапов: сольвофобной сольватации и сольвофобного взаимодействия. Существует много моделей этих этапов. Все они, так или иначе, построены на основе реорганизации структуры растворителя. Мы связываем первый этап - сольвофобную сольватацию, с лабильностью пространственной сетки Н-связей, с широким распределением по углам и расстояниям Н-связей без их разрыва, возможностью легко образовывать достаточно большие полости, способные принять сольвофобную частицу или сольвофобную часть молекулы. Наибольшей лабильностью обладает трехмерная сетка воды, что связано со строением ее молекулы. Второй этап - сольвофобные взаимодействия, связан с упругостью пространственной сетки, способностью ее выталкивать примесные частицы и объединять их вместе так, чтобы уменьшить сольвофобную поверхность. Нами предложено два метода определения упругости пространственной сетки в жидкостях и растворах: из данных по изотермической сжимаемости - модель всестороннего сжатия, и из данных по структурной релаксации - мгновенный модуль сдвига. Упругость сетки - объемная величина. Она оказалась весьма большой - порядка десятков тысяч атмосфер. Эта оценка привела нас к выводу, что именно упругость пространственной сетки Н-связей является движущей силой сольвофобных взаимодействий. Этот механизм согласуется и объясняет термодинамическую трактовку этого процесса.

Работа поддержана грантами РФФИ 06-03-32605, 06-03-32495 и ОХНМ 4.2.

MECHANISMS OF SOLVOPHOBIC EFFECTS

Rodnikova M.N., Chumaevskii N.A.

Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry,
Russian Academy of Science, Moscow, Russia. E-mail: rodnikova@igic.ras.ru

The mechanisms of solvophobic effects have been suggested based on the lability and the elasticity of the spatial H-bond network of a solvent.