

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

Веревка В.Н., Карева Е.Ю., Сальникова Е.В. Исследование механизмов образования циклического фрагмента Cu_2O_2 в ходе реакции взаимодействия оксида меди CuO с молекулами H_2O в основном и возбужденном состояниях // Академия педагогических идей «Новация». – 2017. – № 12 (декабрь). – АРТ 160-эл. – 0,3 п. л. – URL: <http://akademnova.ru/page/875548>

РУБРИКА: ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 541.49

Веревка Виолетта Николаевна

студентка 4 курса, химико-биологический факультет

Оренбургский государственный университет

e-mail: vetusik-forever@mail.ru

Карева Елена Юрьевна

студентка 4 курса, химико-биологический факультет

Оренбургский государственный университет

e-mail: vip_k_helen@mail.ru

Сальникова Елена Владимировна

канд.хим.наук, доцент, химико-биологический факультет

Оренбургский государственный университет

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ОБРАЗОВАНИЯ ЦИКЛИЧЕСКОГО ФРАГМЕНТА Cu_2O_2 В ХОДЕ РЕАКЦИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОКСИДА МЕДИ CuO С МОЛЕКУЛАМИ H_2O В ОСНОВНОМ И ВОЗБУЖДЕННОМ СОСТОЯНИЯХ

Аннотация: Работа посвящена исследованию механизмов образования полиядерных металлических комплексов, которые играют важную роль в выполнении биологических функций ферментов, а также влияют на многие процессы, протекающие в атмосфере земли. В статье представлены основные геометрические и энергетические свойства исследуемых комплексов, а также проанализирована возможность образования циклического фрагмента Cu_2O_2

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

в ходе оптимизации межмолекулярного комплекса оксида меди с тремя молекулами воды в дублетном, квартетном и секстетном состояниях.

Ключевые слова: циклический фрагмент, оксид меди, медь, механизм образования, вода.

Verevka Violetta Nikolaevna

4th year student, faculty of chemistry and biology
Orenburg State University

Kareva Elena Yurievna

4th year student, faculty of chemistry and biology
Orenburg State University

Salnikova Elena Vladimirovna

PhD., Associate Professor
Orenburg State University

**THE STUDY OF THE MECHANISMS OF FORMATION OF
CYCLIC FRAGMENT Cu_2O_2 IN THE REACTION OF INTERACTION OF
COPPER OXIDE CuO WITH H_2O MOLECULES IN GROUND AND
EXCITED STATES**

Abstract: The work is devoted to study of the mechanisms of formation of polynuclear metal complexes, which play an important role in fulfilling the biological functions of enzymes and affect many processes in the earth's atmosphere. The article presents the main geometric and energetic properties of the studied complexes and analyzed the possibility of the formation of cyclic fragment Cu_2O_2 during optimization of the intermolecular complex of copper oxide with three molecules of water in toplenom, Quartet and Sexteto States.

Key words: cyclic fragment, copper oxide, copper, mechanism of formation, water.

Состояние окружающей природной среды является важнейшим фактором, определяющим жизнедеятельность человека и общества. Высокие концентрации многих химических элементов и соединений, обусловленные техногенными процессами, обнаружены в настоящее время во всех природных средах: атмосфере, воде, почве, растениях. Тяжелые металлы относятся к наиболее широко распространенным загрязнителям водной и почвенной среды и по токсичности занимают второе место после пестицидов. Такие элементы, как ртуть, свинец, кадмий, медь, относят к «критической» группе веществ-индикаторов стресса окружающей среды [1].

Медь поступает в воздух с выбросами металлургических производств. В выбросах твердых веществ она содержится в основном в виде соединений, преимущественно оксида меди. Химия полиядерных комплексов меди вызвала значительный интерес для понимания фундаментальной науки магнитных взаимодействий и магнитоструктурных корреляций в молекулярных системах [2].

Стремительно растущий интерес к двуядерным и полиядерным комплексам обуславливает и тот факт, что их структурные единицы участвуют в различных важных процессах бионеорганической химии, особенно транспорт кислорода и активация металлосодержащих белков и ферментов [3].

В настоящей работе исследован процесс образования циклического фрагмента Cu_2O_2 в результате квантово-химического моделирования реакции оксида меди с молекулами воды, рассчитаны энергии полученных циклических фрагментов в различных спиновых состояниях и проведено их сравнение.

Моделирование реакции CuO с молекулами H_2O производили, используя пакеты программ FireFly, а также пакет программ визуализации Chemcraft [4, 5]. Оптимизация геометрии проводилась методом теории функционала плотности (DFT) с использованием базиса 6-31G.

Квантово-химическое моделирование реакции двух молекул оксида меди с молекулами воды проводили в трех различных спиновых состояниях ($m = 2, m = 4, m = 6$). В ходе проведения расчетов было обнаружено, что после оптимизации изначальная геометрия молекул (рисунок 1), а также длины и углы связей меняются, и образуется циклический фрагмент Cu_2O_2 .

Анализ результатов показал, что в ходе оптимизации межмолекулярного комплекса оксида меди с тремя молекулами воды в дублетном и секстетном состояниях происходит образование циклического фрагмента Cu_2O_2 с оксомостиком CuOCu (рисунок 2а, 2в), а в квартетном – цикл не образуется (рисунок 2б). Подобные данные описаны в работе [6].

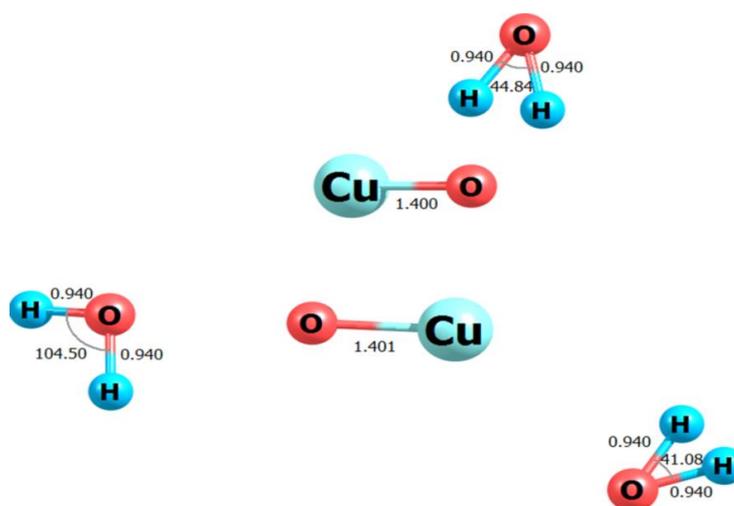


Рисунок 1 – Геометрия молекул до оптимизации

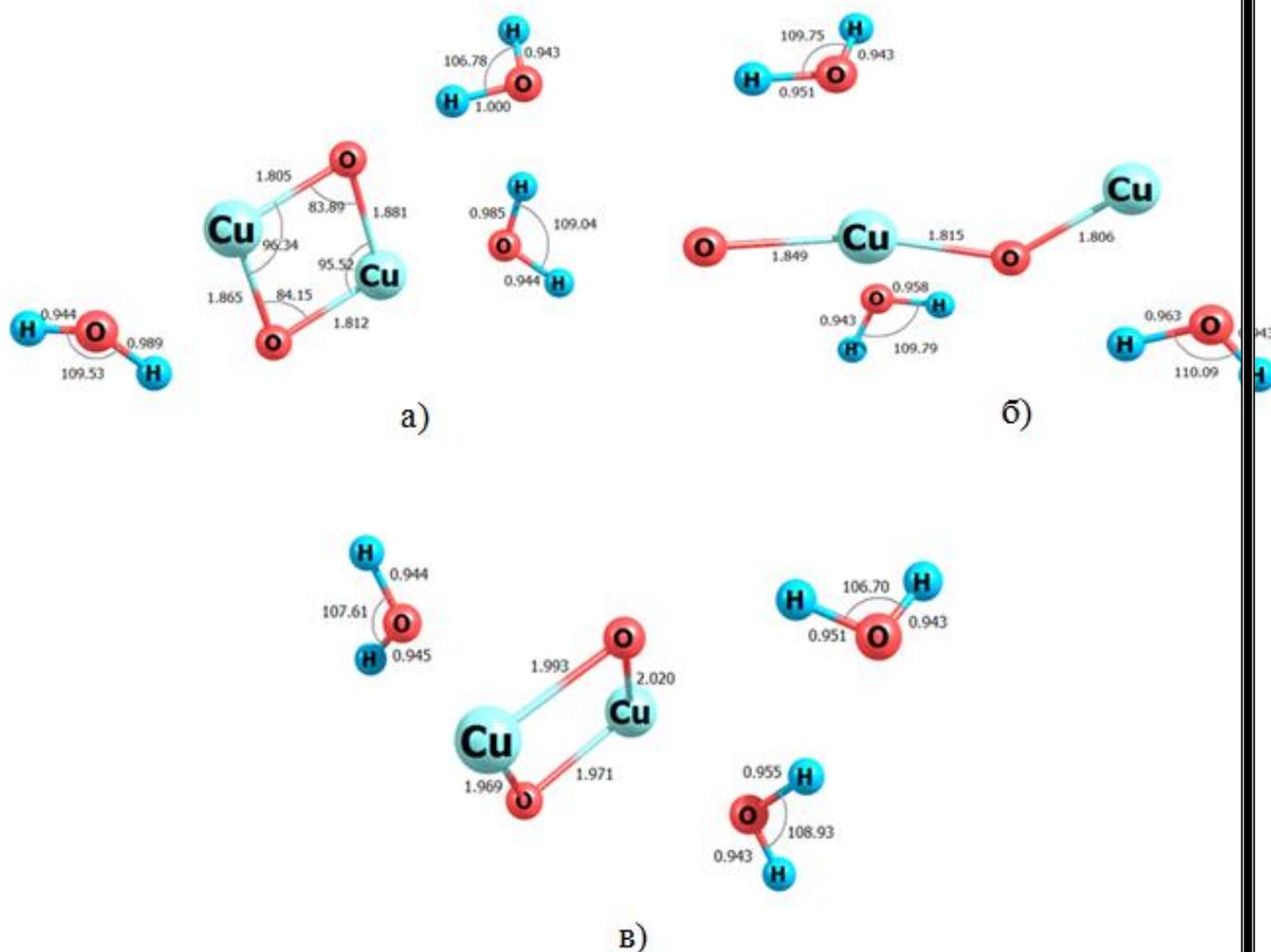


Рисунок 2 – Геометрия молекул после оптимизации в различных спиновых состояниях: а – $^2[2\text{CuO}-3\text{H}_2\text{O}]$; б – $^4[2\text{CuO}-3\text{H}_2\text{O}]$; в – $^6[2\text{CuO}-3\text{H}_2\text{O}]$

Для каждого значения мультиплетности были рассчитаны величины полной энергии (таблица 1).

Таблица 1 – Энергии оптимизированных комплексов $^2[\text{Cu}_2\text{O}_2+3\text{H}_2\text{O}]$, $^4[\text{Cu}_2\text{O}_2+3\text{H}_2\text{O}]$, $^6[\text{Cu}_2\text{O}_2+3\text{H}_2\text{O}]$

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

| Комплекс | Энергия (E), а.е. |
|---|-------------------|
| $^2[\text{Cu}_2\text{O}_2+3\text{H}_2\text{O}]$ | - 3655,2142 |
| $^4[\text{Cu}_2\text{O}_2+3\text{H}_2\text{O}]$ | - 3655,1930 |
| $^6[\text{Cu}_2\text{O}_2+3\text{H}_2\text{O}]$ | - 3655, 1307 |

Таким образом, в результате квантово-химического моделирования реакции двух молекул оксида меди (II) с молекулами воды получили оксомостиновый комплекс Cu_2O_2 в дублетном и секстетном состояниях. Сравнив значения энергий этих комплексов в различных спиновых состояниях, сделали вывод, что наименьшим значением обладает циклический фрагмент с мультиплетностью 2, следовательно, дуплет – основное состояние.

Список использованной литературы:

1. Лазарев, В. Б. Химические и физические свойства простых оксидов металлов / В. Б. Лазарев, В. В. Соболев, И. С. Шаплыгин. – Москва : Наука, 1983. – 239 с.
2. Суевой, Э. П. Окисление наноразмерных пленок меди аммиаком / Э. П. Суевой, Н. В. Борисова, С. П. Говорина. – Кемерово : КемГУ, 2008. – 106 с.
3. Edward , I. O2 Reduction to H2O by the multicopper oxidases / I. Edward, Solomon, Anthony J. Augustine and Jungjoo Yoon Received 16th January 2008, Accepted 28th March 2008 First published as an Advance Article on the web 7th May 2008 DOI: 10.1039/b800799c.
4. Granovsky A.A. Firefly, version 8 // URL: <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index>
5. G.A. Andrienko, ChemCraft, Version 1.8 (build 486), <http://www.chemcraftprog.com>
6. Eliseo Ruiz, Coen de Graaf, Pere Alemany, and Santiago Alvarez / Further Theoretical Evidence for the Exceptionally Strong Ferromagnetic Coupling in Oxo-Bridged Cu(II) Dinuclear Complexes. Centre de Recerca en Química Teòrica (CeRQT), Departament de Química Inorgànica and Departament de Química Física, UniVersitat de Barcelona, Diagonal 647, 08028 Barcelona, Spain.

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

7. Ulises Reveles, J. Reactivity Trends in the Oxidation of CO by Anionic Transition Metal Oxide Clusters / J. Ulises Reveles, Grant E. Johnson, Shiv N. Khanna. Department of Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, Virginia 23284-2000, and Departments of Chemistry and Physics, The Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania 16802.

Дата поступления в редакцию: 05.12.2017 г.

Опубликовано: 11.12.2017 г.

© Академия педагогических идей «Новация», электронный журнал, 2017

© Верева В.Н., Карева Е.Ю., Сальникова Е.В., 2017