

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. Бимолекулярные комплексы железа с газами атмосферы // Академия педагогических идей «Новация». – 2017. – № 12 (декабрь). – АРТ 159-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

e-mail: vip_k_helen@mail.ru

Оренбургский государственный университет,

г. Оренбург, Российская Федерация

**БИМОЛЕКУЛЯРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ЖЕЛЕЗА С ГАЗАМИ
АТМОСФЕРЫ**

Аннотация: Данная статья посвящена исследованию возможности образования бимолекулярных комплексов Fe с газами атмосферы. Рассчитаны значения энергий полученных систем и сделаны выводы об устойчивости образующихся комплексов.

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

Ключевые слова: бимолекулярные комплексы, железо, газ, атмосфера, структура.

Kareva Elena Yurievna

4th year student, faculty of chemistry and biology

Orenburg State University

Verevka Violetta Nikolaevna

4th year student, faculty of chemistry and biology

Orenburg State University

Salnikova Elena Vladimirovna

PhD., Associate Professor

Orenburg State University

BIMOLECULAR COMPLEXES OF IRON WITH GASES OF THE ATMOSPHERE

Abstract: This article examines the possibility of formation of bimolecular complexes of Fe with the gases of the atmosphere. The calculated values of the energies of the resulting systems, and conclusions about the stability of the resulting complexes.

Key words: bimolecular complexes, iron, gas, atmosphere, structure.

В последние годы много внимания уделяется проблемам изменения климата Земли и разрушения озонового слоя, а также поиску методов минимизации отрицательного воздействия индустрии и сельского хозяйства на окружающую среду. Известно, что загрязнение атмосферы городских и промышленных центров связано с протеканием фотохимических реакций, в

которых происходит укрупнение частиц смога за счет коагуляции индивидуальных молекул и межмолекулярных комплексов [1].

Межмолекулярные комплексы газов, которые содержат в своем составе такие металлы как Fe, Zn, Ni, Cu, довольно часто служат основой малых кластеров аэрозолей, что определяет многие атмосферные явления под воздействием энергии солнца. Большое количество этих металлов в виде промышленных загрязнений выбрасываются в атмосферу, что оказывает негативное влияние на экологию и способствует изменению климата [2].

Соединения, в состав которых входит Fe, содержатся в выбросах предприятий теплоэнергетики, черной и цветной металлургии, стройматериалов, а также автомобильного транспорта. Пыль, осаждающаяся в индустриальных районах, содержит до 20 % оксида железа [3]. Вода с большим количеством железа (больше 1-2 мг/л) характеризуется плохими вкусовыми качествами. Она имеет неприятный вяжущий вкус и непригодна для промышленных целей. Аэрозоли (пыль, дым) железа и его оксидов, руд и других соединений при длительном воздействии откладываются в легких и вызывают специфическое заболевание легких – сидероз.

Цель исследования – определить возможность образования бимолекулярных комплексов Fe со следующими газами атмосферы: O₂, H₂O, H₂S, CO₂, NH₃, CO, NO, SO₂, NO₂.

Квантово-химический расчет бимолекулярных комплексов железа с газами атмосферы производили, используя пакет программ FireFly, а также пакет программ визуализации Chemcraft [4, 5]. Оптимизация геометрии бимолекулярных комплексов проводилась методом теории функционала плотности (DFT) с использованием базиса 6-31G.

Были определены структуры комплексов: $[\text{Fe-CO}_2]^0$, $[\text{Fe-O}_2]^0$, $[\text{Fe-CO}]^0$, $[\text{Fe-H}_2\text{O}]^0$, $[\text{Fe-H}_2\text{S}]^0$, $[\text{Fe-NH}_3]^0$, $[\text{Fe-NO}]^0$, $[\text{Fe-NO}_2]^0$, $[\text{Fe-SO}_2]^0$.

Результаты расчета кривой зависимости полной энергии от радиуса R (Fe-C) показывают, что возможно образование бимолекулярного комплекса $[\text{Fe-CO}]^0$, но он неустойчив ($D_e = 0,36$ эВ) (рисунок 1). Энергия разрушения комплекса составила $E_{a1} = 0,028$ эВ, а энергия образования комплекса $E_{a2} = 0,3$ эВ. В равновесной точке с радиусом R (Fe-C) = $1,79$ Å, минимальная энергия $E = -1376,787$ а.е.м.

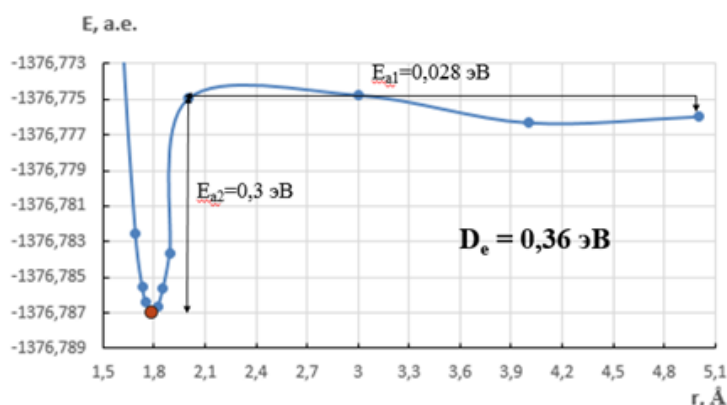


Рисунок 1 – Зависимость полной энергии системы от расстояния R (Fe-C) в комплексе $[\text{Fe-CO}]^0$

Анализ кривой зависимости полной энергии от радиуса R (Fe-C) показал, что образуется достаточно устойчивый бимолекулярный комплекс $[\text{Fe-CO}_2]^0$ с $D_e = 0,66$ эВ (рисунок 2).

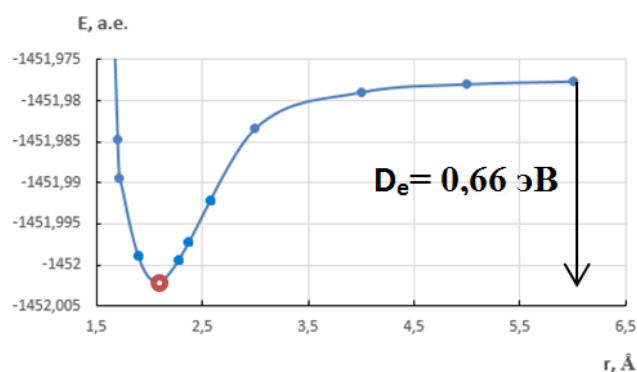


Рисунок 2 – Зависимость полной энергии системы от расстояния R (Fe-C) в комплексе $[\text{Fe-CO}_2]^0$

При взаимодействии железа с водой образуется малоустойчивый комплекс $[\text{Fe-H}_2\text{O}]^0$ с энергией диссоциации $D_e = 0,61$ эВ (рисунок 3). В равновесной точке с радиусом R (Fe-O) = 2,09 Å, минимальная энергия $E = -1339,926$ а.е.м.

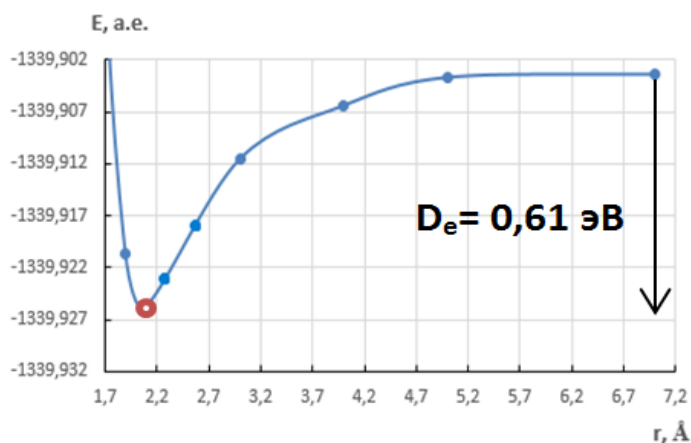


Рисунок 3 – Зависимость полной энергии системы от расстояния R (Fe-O) в комплексе $[\text{Fe-H}_2\text{O}]^0$

Результаты расчета кривой зависимости полной энергии от радиуса R (Fe-S) показывают, что комплекс $[\text{Fe-H}_2\text{S}]^0$ не образуется (рисунок 4).

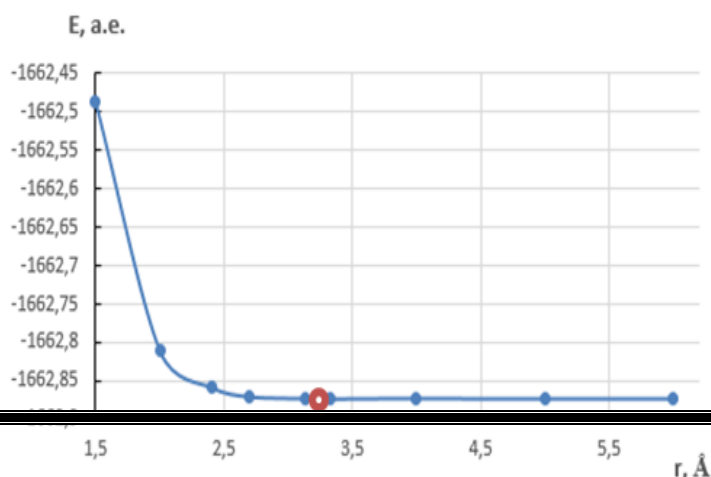


Рисунок 4 – Зависимость полной энергии системы от расстояния R (Fe-S) в комплексе $[\text{Fe-H}_2\text{S}]^0$

Результаты расчета кривой зависимости полной энергии от радиуса R (Fe-N) показывают, что возможно образование неустойчивого бимолекулярного комплекса $[\text{Fe-NH}_3]^0$ с $D_e = 0,14$ эВ (рисунок 5). В равновесной точке с радиусом R (Fe-N) = 2,48 Å, минимальная энергия составляет $E = -1320,054$ а.е.м.

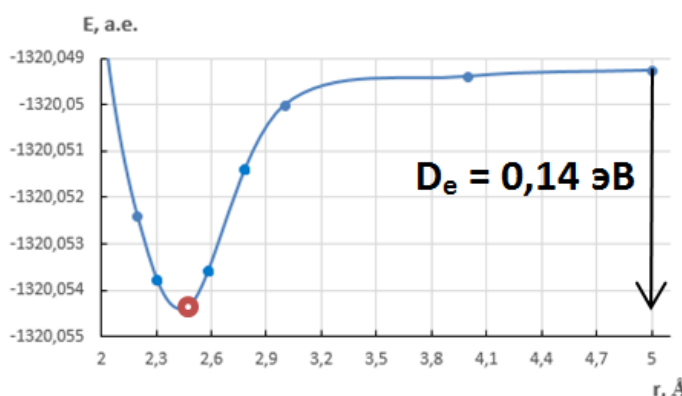


Рисунок 5 – Зависимость полной энергии системы от расстояния R (Fe-N) в комплексе $[\text{Fe-NH}_3]^0$

Квантово-химический расчет комплекса железа с оксидом азота (II) показал, что образуется устойчивый бимолекулярный комплекс $[\text{Fe-NO}]^0$ с энергией диссоциации $D_e = 3,44$ эВ (рисунок 6).

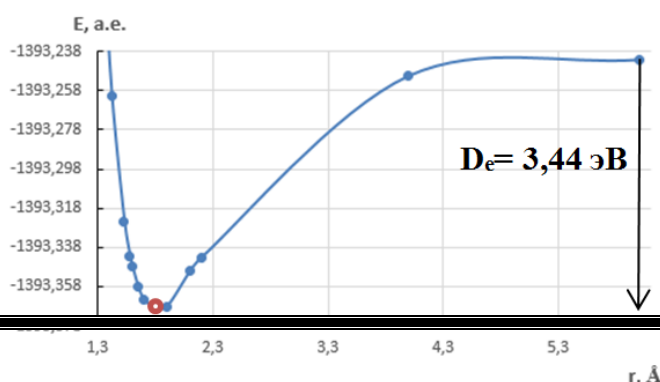


Рисунок 6 – Зависимость полной энергии системы от расстояния R (Fe-N) в комплексе $[\text{Fe-NO}]^0$

В результате оптимизации молекул железа и оксида азота (IV) происходит образование устойчивого комплекса $[\text{Fe-NO}_2]^0$ с энергией диссоциации $D_e = 1,53$ эВ (рисунок 7). В равновесной точке с радиусом $R(\text{Fe-N}) = 1,84$ Å комплекс обладает минимальной энергией $E = -1468,598$ а.е.м.

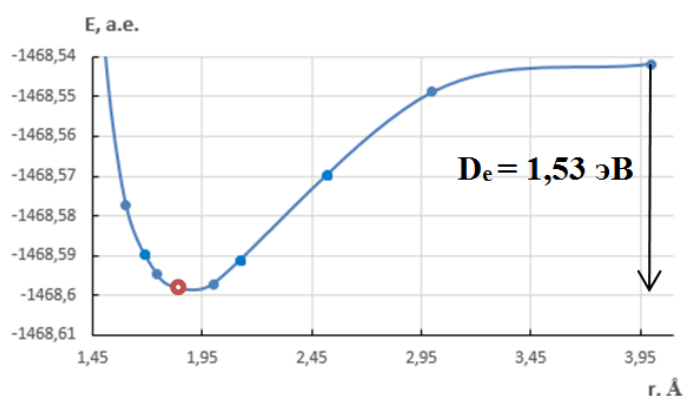


Рисунок 7 – Зависимость полной энергии системы от расстояния R (Fe-N) в комплексе $[\text{Fe-NO}_2]^0$

Результаты расчета зависимости полной энергии от расстояния R (Fe-O) показывают, что бимолекулярный комплекс не образуется (рисунок 8), что согласуется с экспериментальными данными, представленными в работе [7].

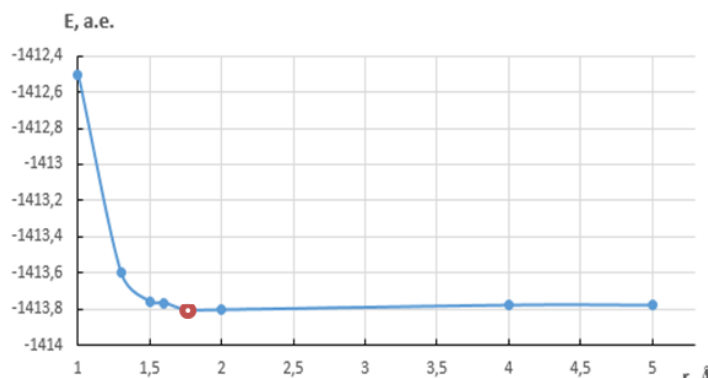


Рисунок 8 – Зависимость полной энергии системы от расстояния R (Fe-O) в комплексе $[\text{Fe-O}_2]^0$

При оптимизации молекул железа и оксида серы (IV) образуется устойчивый бимолекулярный комплекс, энергия диссоциации которого $D_e = 3,32$ эВ (рисунок 9). Энергия разрушения комплекса составила $E_{a1} = 0,05$ эВ, а энергия образования $E_{a2} = 3,27$ эВ.

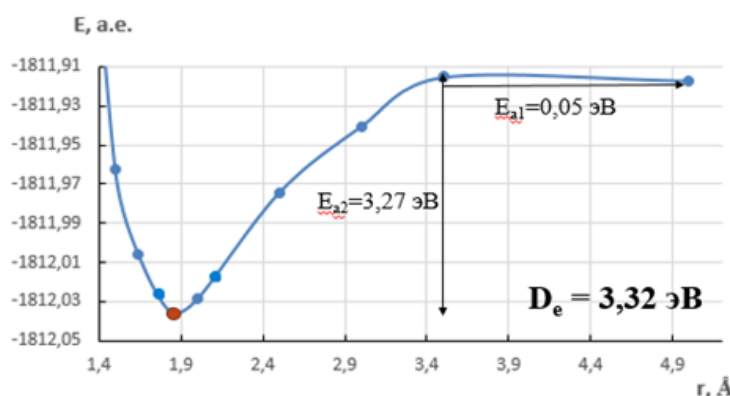


Рисунок 9 – Зависимость полной энергии системы от расстояния R (Fe-S) в комплексе $[\text{Fe-SO}_2]^0$

Таким образом, в ходе исследования было установлено, что:

- 1) железо образует бимолекулярные комплексы: $[\text{Fe-CO}_2]^0$, $[\text{Fe-CO}]^0$, $[\text{Fe-H}_2\text{O}]^0$, $[\text{Fe-NH}_3]^0$, $[\text{Fe-NO}]^0$, $[\text{Fe-NO}_2]^0$, $[\text{Fe-SO}_2]^0$;
- 2) комплексы $[\text{Fe-H}_2\text{S}]^0$, $[\text{Fe-O}_2]^0$ не образуются;
- 3) наиболее устойчивым является комплекс $[\text{Fe-NO}]^0$ с энергией диссоциации $D_e = 3,44$ эВ; наименее устойчивый – комплекс $[\text{Fe-NH}_3]^0$ ($D_e = 0,14$ эВ).

Список использованной литературы:

1 Заика, Ю.В. Геометрическая структура и колебательные спектры би- и тримолекулярных комплексов в составе атмосферы / Ю.В. Заика, Г.И. Кобзев, З. Футтеркнехт // Вестник ОГУ, № 1 (162) / 2014. – с. 88 – 92

2 Кобзев, Г.И. Устойчивость три- и тетрамежмолекулярных комплексов, содержащих атом Zn / Г.И. Кобзев, Т.И. Зверева // Вестник ОГУ, №1 (162) / 2014 с. 104 – 107

3 Филов, В.А. Вредные химические вещества. Неорганические соединения элементов V-VIII групп / В.А. Филов. – Л.: Химия, 1989. – 592 с.

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 Becke, A.D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior // Physical Review A.– 1988.– Vol. 38.– №6. – P.3098–3100

7 Chertihin G.V., Saffel W., Yustein J.T. et al. Reactions of Laser-Ablated Iron Atoms with Oxygen Molecules in Condensing Argon. Infrared Spectra and Density Functional Calculations of Iron Oxide Product Molecules // J. Phys. Chem. – 1996. – V. 100 (13). – P. 5261-5273.

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