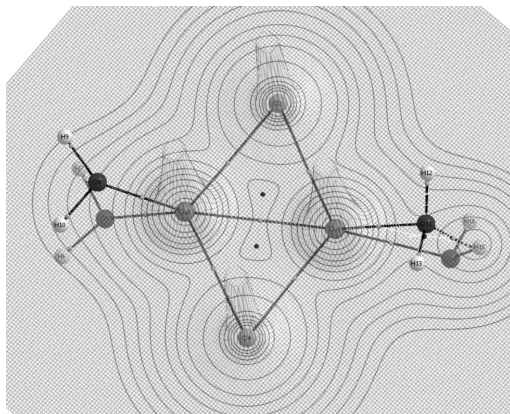


МОДЕЛЮВАННЯ КЛАСТЕРІВ $[\text{Cu}^+\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_n]$ У ВОДНОМУ РОЗЧИНІ*Курасова Ю. Д.,* Осокін Є. С., Варгалюк В. Ф., Полонський В. А.Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, Дніпро, Україна
osokin@cf.dnu.dp.ua

В літературі є відомості, що іони Cu^+ з хлорид-аніонами у водному розчині можуть утворювати димери $[\text{Cu}^+\text{Cl}_2]$. Але не має даних, щодо впливу водного середовища на структуру та енергію зв'язування таких сполук.

Був проведений аналіз розподілу електронної густини за методом Бейдера (QAİM) та розраховані енергії зв'язування (E_b) між атомами в кластерах складу $[\text{Cu}^+\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_n]$, а також розраховані ефективні заряди (z) на атомах Купруму за теорією натуральних орбіталей (NBO). Квантово-хімічні розрахунки виконані в програмі Gaussian 09, AIM2000 та AIMALL, методика проведення розрахунків наведена в роботі [1]. Було показано, що для всіх кластерів $[\text{Cu}^+\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_n]$, де $n = 0, 2, 4$ у площині $\text{Cu}-\text{Cl}-\text{Cu}-\text{Cl}$ на поверхні електронної густини (ЕГ) утворюється два цикли з двома мінімумами ЕГ (на рис. 1, дрібні червоні точки). У димері максимально може утримуватись у внутрішній координаційній сфері (в.к.с) до 4 молекул води (по 2-ві на кожний атом Купруму). В процесі приєднання молекул води до в.к.с $[\text{Cu}^+\text{Cl}_2]$ ЕЗ для $\text{Cu}-\text{Cu}$ -зв'язку зменшується в межах 13–17 кДж/моль. Середнє значення $\text{Cu}-\text{Cl}$ -зв'язків рівномірно зменшується в процесі приєднання молекул води до в.к.с. Середній ефективний заряд на атомах Купруму також зменшується майже лінійно ($R^2 = 0,9726$). Найбільше середнє значення ЕЗ $\text{Cu}-\text{H}_2\text{O}$ спостерігається для кластеру $[\text{Cu}^+\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]$, і становить $-128,35$ кДж/моль.

Рис. 1. Поверхня електронної густини у площині $\text{Cu}-\text{Cl}-\text{Cu}-\text{Cl}$ для $[\text{Cu}^+\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]$ Таблиця 1. Енергії зв'язування (в кДж/моль) $[\text{Cu}^+\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_n]$

Кластери	$-E_b(\text{Cu}-\text{Cu})$	$-E_b(\text{Cu}-\text{Cl})$	$-E_b(\text{Cu}-\text{H}_2\text{O})$	$z(\text{Cu})$
$[\text{Cu}^+\text{Cl}_2]$	68,43	97,33	—	0,668
$[\text{Cu}^+\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	51,01	87,21	128,35	0,552
$[\text{Cu}^+\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]$	55,07	77,51	79,10	0,489

В подальшому ці дані будуть використанні для моделювання подібних кластерів з малеїноювою кислотою у водному розчині.

[1] Features of ($d\pi$ - π)-binding of Cu(I) ions with acrylic, maleic and fumaric acids in aqueous solution / V. F. Vargalyuk, Y. S. Osokin, V. A. Polonsky, V. N. Glushkov // Journal of Chemistry and Technologies. 2019. Vol. 27, No. 2. P. 148–157.