

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФУМАРАТНИХ ТА МАЛЕЇНАТНИХ π -КОМПЛЕКСІВ ІОНІВ Cu^+ В РОЗЧИНІ ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИДУ

*Крупній Ф. А.*¹, *Осокін Є. С.*²

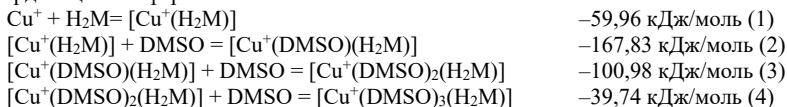
¹Комунальний заклад «Науковий ліцей імені Анатолія Лигуна»

Кам'янської міської ради, Кам'янське, Україна

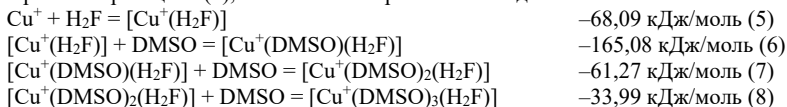
²Primus Inter Pares School, Дніпро, Україна

krupiy2008@gmail.com

В попередній роботі [1] вивчалися особливості геометричної та електронної будови комплексів Cu^+ з диметилсульфоксидом (далі – DMSO). В дослідженні розглядалися комплекси іонів Cu^+ з малеїною та фумаровою (далі – H_2M та H_2F) кислотами. Квантово-хімічні розрахунки виконані в програмі Gaussian 09 на рівні DFT, методика наведена в роботі [1]. Для порівняння стабільності комплексів були розраховані реакції приєднання молекул H_2M , H_2F та DMSO до внутрішньої координаційної сфери Cu^+ :



При додаванні ліганду (H_2M) до комплексів виду $[\text{Cu}^+(\text{DMSO})_x]$, їх стабільність значно збільшувалась. Для порівняння був розрахований енергетичний ефект утворення відповідних комплексів. З отриманих даних видно, що комплекс $[\text{Cu}^+(\text{DMSO})_3(\text{H}_2\text{M})]$ утворений за реакцією (4), є найбільш енергетично вигідним.



Замінивши ліганд H_2M на H_2F отримали зміни енергетичних ефектів відповідних реакцій. З отриманих даних видно, що комплекс $[\text{Cu}^+(\text{DMSO})_3(\text{H}_2\text{F})]$ утворений за реакцією (8) є найбільш енергетично вигідним. За допомогою QAIM було обчислено енергії зв'язування іону Купруму з ненасиченим $\text{C}=\text{C}$ -зв'язком та атомами Оксигену (DMSO) у внутрішній координаційній сфері. Встановлено, що у комплексі $[\text{Cu}^+(\text{DMSO})_3(\text{H}_2\text{M})]$ іон Cu^+ має два зв'язки з $\text{C}=\text{C}$ -фрагментом кислоти; у $[\text{Cu}^+(\text{DMSO})_3(\text{H}_2\text{F})]$ іон Cu^+ локалізований лише на одному атомі Карбону. Порівняно теоретичні та експериментальні UV-VIS спектри та підтверджено, що синтезовані у розчині DMSO π -комплекси Купруму з досліджуваними кислотами відповідають складу $[\text{Cu}^+(\text{DMSO})_3(\text{H}_2\text{M})]$ та $[\text{Cu}^+(\text{DMSO})_3(\text{H}_2\text{F})]$.

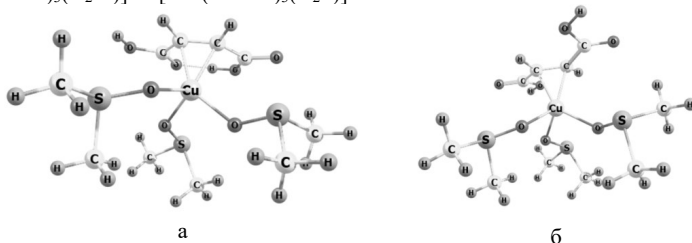


Рис. 1. Геометрична будова комплексів: а) $[\text{Cu}^+(\text{DMSO})_3(\text{H}_2\text{M})]$, б) $[\text{Cu}^+(\text{DMSO})_3(\text{H}_2\text{F})]$

1. Крупній Ф.А. Геометрична та електронна будова комплексів Cu^+ в розчині диметилсульфоксиду / Ф.А. Крупній, Є.С. Осокін // Відкрита наука України: Візійний дискурс в умовах воєнного стану. 2023. Р. 359–360.