

## Квантово-химическое моделирование фотовосстановления ацетата меди

© Брусницына<sup>1, 2\*†</sup> Людмила Александровна, Степановских<sup>1</sup> Елена Ивановна,  
Алексеева<sup>1</sup> Татьяна Анатольевна, Осипчук<sup>2</sup> Александр Олегович  
и Буданов<sup>2</sup> Борис Владимирович

<sup>1</sup> Кафедра физической и коллоидной химии. Уральский федеральный университет им. первого  
Президента России Б.Н. Ельцина. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.  
E-mail: brusnitsyna.l@yandex.ru

<sup>2</sup> Уральский институт Государственной противопожарной службы МЧС России.  
Ул. Мира, 22. г. Екатеринбург, 620062. Россия.

\*Ведущий направление; † Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** фотовосстановление, фотоактивация поверхности, электронная структура, энергетические уровни, квантово-химический механизм.

### Аннотация

Исследован водный раствор для фотоселективной активации диэлектрических материалов на основе ацетата меди(II) в качестве фотопротора и натриевой соли антрахинон-2-сульфокислоты в качестве оптического сенсбилизатора. В качестве вторичного восстановителя в состав фотоактиватора вводился сорбит и этанол.

На основе квантово-химического моделирования разработан механизм процесса фотовосстановления меди(II) в данной композиции.

Показана определяющая роль в механизме передачи электронной плотности от антрахинона на вакантные орбитали меди возбужденных триплетных долгоживущих электронных состояний антрахинона и флуктуации поляризации, которые обеспечивают выравнивание энергетических уровней донора и электронной плотности акцептора.

Установлено, что промежуточным продуктом фотовосстановления соединений меди(II) является ион одновалентной меди, который далее путем темновых реакций или диспропорционирования переходит в металлическую медь.