

Моделирование сорбции низкомолекулярных соединений на поверхности фталоцианина меди методом теории функционала плотности

© Дегтярев*⁺ Андрей Александрович, Зарапина Ирина Вячеславовна
и Здерева Алена Владимировна

Кафедра «Химия и химические технологии». Тамбовский государственный технический университет.
ул. Советская, 106. г. Тамбов, 392000. Россия. Тел.: (4752) 63-44-44. E-mail: ad.dycost@gmail.com;
zarapina@mail.ru; azderevaa@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фталоцианин меди, DFT, сорбция, гидрофильность, этанол, COSMO.

Аннотация

В работе исследованы процессы сорбции молекул воды и этанола на поверхность фталоцианина меди из газовой и водной фаз.

В качестве расчетного метода применялась теория функционала плотности с функционалами PBE, PBE0, B3LYP, LC-BLYP, ω B97x, базисами L1, 6-31G**, cc-pVDZ и поправками на дисперсионное взаимодействие D3BJ, D2. Учет неспецифического взаимодействия с растворителем осуществлялся по континуальной модели COSMO, оценка вклада специфического взаимодействия осуществлялась на основании сравнения с экспериментальными данными. Поверхность фталоцианина меди моделировалась четырехмолекулярным кластером, с кристаллографическими поверхностями (100) и (130).

Было определено, что молекулы воды образуют с поверхностью фталоцианина меди три типа комплексов: с двумя водородными связями через атомы азота поверхности (100) (-42.61 кДж/моль), одной водородной связью через атом поверхности (100) (-30.71 кДж/моль) и через атом меди на поверхности (130) (-23 кДж/моль). Неспецифическое взаимодействие с растворителем уменьшает энергию образования комплексов через водородную связь на 20-25 кДж/моль, а комплексов через атом меди на 10 кДж/моль. Молекулы этанола образуют с поверхностью фталоцианина меди три типа комплексов: с водородной связью через атомы азота поверхности (100) (-34.5÷-38 кДж/моль), четырехцентровой водородной связью с участием атомов азота и меди поверхности (130) (-30.12 кДж/моль) и через атом меди на поверхности (130) (-38.78 кДж/моль). Неспецифическое взаимодействие с растворителем уменьшает энергию образования на 9-12 кДж/моль для комплексов с поверхностью (100), на 3 и на 8.5 кДж/моль для комплексов с поверхностью (130). Учет специфической сольватации приводит к положительным теплотам сорбции этанола из водного раствора на поверхность фталоцианина меди (3.09-10.26 кДж/моль), что соответствует константам равновесия этанола между жидкой фазой и поверхностью 0.016-0.287, что говорит о возможности использования этанола в качестве гидрофилизирующей поверхности добавки.