

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ АКТИВНЫХ ЦЕНТРОВ БИОНАНОКОМПЛЕКСОВ

Васильева Л.Ю., Уварова Л.А.¹, Романова Е.Ю.²

Московская государственная академия водного транспорта, Москва, Россия,

¹ФГБОУ ВПО МГТУ «СТАНКИН», Москва, Россия,

²ФГБОУ ВО Тверская сельскохозяйственная академия, Тверь, Россия

117105, Новоданиловская набережная, д.2, корп.1,

¹127055, Вадковский пер., д. 3А

²170904, Тверская область, г. Тверь, ул. Маршала Василевского (Сахарово), д. 7

E-mail: kati-v@yandex.ru

Активные центры, содержащие ионы переходных металлов, относятся к комплексным соединениям. Метод валентных связей (ВС) позволяет смоделировать возникновение координационной связи между центральным ионом и лигандами по донорно-акцепторному механизму.

Теория поля лигандов, включающая метод молекулярных орбиталей в применении к многоатомным комплексным соединениям и обобщенные представления теории кристаллического поля, дает возможность представить электронную структуру активного центра.

В теории электронного строения и свойств координационных соединений большое значение имеют представления о симметрии, наиболее полное описание которых достигается с помощью математической теории групп. Используя теорию симметрии и теорию групп, моделируется стереохимическая структура активного центра и образование молекулярных орбиталей комплекса [1, 2].

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (задание № 2014/105, проект № 1441).

Литература.

1. Васильева Л.Ю., Уварова Л.А., Романова Е.Ю. Моделирование мезо- и нанообъектов в различных средах и полях. – Тверь: ООО «Лаборатория деловой графики», 2010. 201 стр.
2. Васильева Л.Ю., Уварова Л.А., Романова Е.Ю. Некоторые проблемы нанотехнологий. Исследования и моделирование наносистем: наноконплексов, кластеров и наночастиц. Учебное пособие/ Л.Ю. Васильева, Л.А. Уварова, Е.Ю. Романова. – М.: Янус-К, 2015. 162 стр.