

ЭНЕРГИИ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ СОЕДИНЕНИЙ ЗАДЕЙСТВОВАННЫХ В РЕАКЦИЯХ МЕТИЛИДИНОВОГО РАДИКАЛА CH С ЦИАНИСТЫМИ МОЛЕКУЛАМИ R-CN

Крикунова Л.И.¹, Николаев А.^{1,2}, Мебель А.М.¹, Порфирьев Д.П.^{1,2}

¹Самарский университет, г. Самара, Россия, lubov_markova@inbox.ru

²Филиал ФИАН, г. Самара, Россия

Ключевые слова: поверхность потенциальной энергии, астрохимия, квантовая механика

Рассмотрена химическая реакция взаимодействия молекулы синильной кислоты (HCN) с метилидиновым радикалом (CH). Реакция интересна как потенциально один из ключевых шагов в образовании биологически важных молекул. В частности, в ходе реакций с цианистыми молекулами возможно получение азотистых оснований участвующих в цепочках ДНК. [1] Азотистые соединения, взаимодействующие со свободным метилидиновым радикалом, содержатся в большом количестве в атмосфере спутника Сатурна – Титана, а так же в межзвездных молекулярных облаках. [2] Наличие большого количества азота в атмосфере Титана обуславливает возможность появления целого класса органических соединений – нитрилов, формально являющихся C-замещенными производными синильной кислоты HCN [3].

Цель данной работы разработка механизма реакции молекулы синильной кислоты HCN с метилидиновым радикалом CH. С помощью квантово-механических расчетов высокого уровня, позволяющих обеспечить химическую точность получаемых энергий и в дальнейшем кинетическую точность констант скоростей, были найдены оптимальные геометрии для промежуточных и переходных состояний, реагентов и продуктов реакции; колебательные частоты и значения относительных энергий. Геометрии различных соединений были оптимизированы с использованием гибридного метода функционала плотности wB97XD с базисным набором cc-pvtz в программе Gaussian 09 [4]. Для уточнения полученных методом wB97XD энергий был применен метод связанных кластеров CCSD(T)-F12 с корреляционно-согласованным базисным набором cc-pVTZ-F12 в программном пакете MOLPRO 2010 [5].

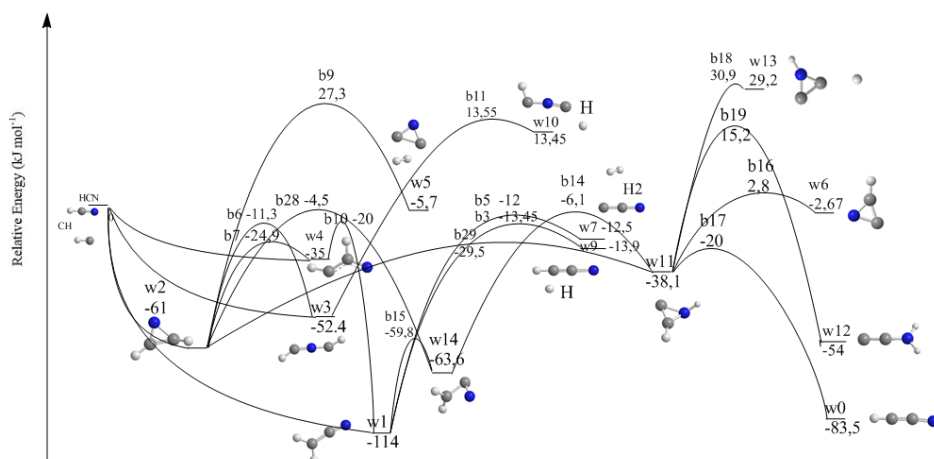


Рис. 1 – Поверхность потенциальной энергии реакции молекулы синильной кислоты HCN и метилидинового радикала CH

Анализ полученной поверхности потенциальной энергии позволяет выбрать наиболее вероятные пути реакции. Энергетически более выгодным будет течение реакции по пути w2-w11-w6 и w2-w11-w0. Полученные в результате реакции цепочка атомов w0 и кольцевая структура w6 могут взаимодействовать с новыми радикалами, и образовывать всё более сложные структуры.

Список литературы

1. Turner, A.M., Kaiser, R.I. // Exploiting Photoionization Reflectron Time-of-Flight Mass Spectrometry to Explore Molecular Mass Growth Processes to Complex Organic Molecules in Interstellar and Solar System Ice Analogs
2. R.I. Kaiser, A.M. Mebel, V.V. Kislov, S.J. Klippenstein, L.B. Harding, M.C. Liang, and Y.L. Yung. // A crossed molecular beams study on the formation of the exotic cyanoethynyl radical in titan's atmosphere x. Gu1, / astrophysical journal volume 701, issue
3. X.Gu, Y.S. Kim, R.I. Kaiser, A.M. Mebel, M.C. Liang, Y.L. Yung // Chemical dynamics of triacetylene formation and implications to the synthesis of polyynes in Titan's atmosphere // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America Volume 106, Issue 38, 22 September 2009, Pages 16078-16083
4. Frisch M.J. [et. al], Gaussian 09, revision B.01 // Gaussian Inc.: Wallingford. CT. 2010.
5. Werner H.-J. [et. al], MOLPRO, version 2010.1, a package of ab initio programs // URL: <http://www.molpro.net>, 2015.

Сведения об авторах

Крикунова Любовь Ивановна, студент-магистрант Самарского университета. Область научных интересов: физика, астрономия.

Николаев Анатолий, студент-магистрант Самарского университета, лаборант-исследователь НИЛ-101. Область научных интересов: астрохимия, химическая физика.

Мebel Александр Моисеевич, ведущий ученый НИЛ-101. Область научных интересов: физика, химия, астрономия, химическая инженерия, материаловедение, генетическая и молекулярная биология, биохимия, медицина.

Порфирьев Денис Петрович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики. Область научных интересов: физика, астрономия, химия, компьютерные науки, химическая инженерия, материаловедение, математика.

THE ENERGIES AND MOLECULAR PARAMETERS INVOLVED IN THE REACTION OF CYANIDE MOLECULES WITH METHYLIDYNE RADICAL

Krikunova L.I.¹, Nikolayev A.^{1,2}, Mebel A.M.¹, Porfirev D.P.^{1,2}

¹Samara National Research University, Samara, Russia, lubov_markova@inbox.ru

²Physical Institute named after P.N. Lebedeva, Samara, Russia

Keywords: potential energy surface, astrochemistry, quantum mechanics

The chemical interaction reaction of a hydrocyanic acid (HCN) molecule with a methylidene radical (CH) is considered. It takes place at extremely low temperatures. Under such conditions, the molecules interaction with the formation of aromatic compounds can lead biologically important molecules formation. In particular, in the course of reactions with cyanide molecules, it is possible to obtain nitrogenous bases participating in DNA chains. [1] Nitrogen compounds interacting with the free methylidene radical are found in large quantities in the atmosphere of Saturn's moon Titan, as well as in interstellar molecular clouds. [2] The presence of a large amount of nitrogen in the atmosphere of Titan gives rise to the appearance of a whole class of organic compounds – nitriles, which are formally C-substituted derivatives of hydrocyanic acid HCN. [3].