

## ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В РАСТВОРЕ ЦИСТЕИНА И НИТРАТА СЕРЕБРА. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ

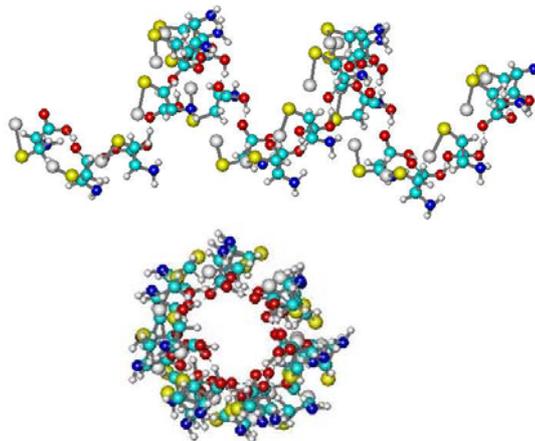
**И.П. Санников, И.В. Михайлов, П.В. Комаров, П.М. Пахомов**

*Кафедра физической химии, Тверской государственный университет  
e-mail: Gzommozg@mail.ru*

Несколько лет назад нами обнаружено, что водный раствор цистеина и нитрата серебра при нормальных условиях может образовывать устойчивый гель, представляющий как научный, так и практический интерес. Уникальной особенностью выявленной системы является способность структурироваться при весьма малой концентрации низкомолекулярных компонентов – ~0,01 % [1]. Было сформулировано несколько версий относительно процессов, происходящих в изучаемой системе. Предположительно, на начальной стадии в растворе формируются цепочки из молекул меркаптида серебра (МС), а также металлические комплексы молекул МС с ионами серебра, которые на последующих стадиях сшиваются между собой низкомолекулярными анионами  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{MoO}_4^{2-}$ ,  $\text{WO}_4^{2-}$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ .

Целью данного исследования является изучение супрамолекулярных полимерных цепочек из молекул МС, а также металлических комплексов, которые могут формироваться между ионами серебра и молекулами МС, с помощью метода ZINDO/1.

В ходе расчетов изучены оптимальные геометрии цепочек из молекул МС и возможных металлических комплексов  $\text{Ag}^+ - \text{МС}$ , формируемых двумя, тремя и четырьмя молекулами МС, а также рассчитаны энергетические характеристики и электронные спектры полученных структур. С помощью сравнения с экспериментом отобраны комплексы, спектральные линии которых получились наиболее близкими к экспериментальным данным. Полученные результаты имеют большое значение для дальнейшего изучения системы и понимания механизмов формирования пространственной гель-сетки в водных растворах цистеина и нитрата серебра.



Пример полученной цепочки из 20 молекул МС

Работа выполнена при финансовой поддержке АВЦП (грант Минобрнауки РФ «Развитие научного потенциала высшей школы» № 2.1.1./6867).

### Литература

1. Pakhomov P.M., et al. Study of gelation in aqueous solutions of cysteine and silver nitrate // Colloid Journal. 2004. V. 66, № 1. P. 65.