

ЛИТЕРАТУРА

1. Анисимов В.Н., Рейтер Р.Д. Функции эпифиза при раке и старении // Вопросы онкологии – 1990. – Т. 36. – С. 259–268.
2. Анисимов В.Н. Мелатонин: роль в организме, применение в клинике. – СПб.: Система, 2007. – 40 с.
3. Кветная Т.В., Князькин И.В. Мелатонин: Роль и значение в возрастной патологии/РАМН; Под ред. проф. В.Х. Хавинсона. – СПб.: ВМЕДА, 2003. – 94 с.
4. Левин Я.И. Мелатонин и неврология // Русский медицинский журнал. – 2007. – № 24. – С. 1851-1855.
5. Громова В.Ф., Шаповал Г.С., Кухарь В.П., Пивень В.И. Электрохимическое моделирование элементарных стадий окислительно-восстановительных реакций в биосистемах // Доповіді НАН України. – 1995. – № 3. – С. 92-94.
6. Шаповал Г.С., Кузнецова Т.Ю., Соловйов В.В., Кругляк О.С. Электрохимическое исследование антиоксидантных свойств мелатонина // Доповіді НАН України. – 2009. – № 9. – С. 159-164.

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯ КАТИОНОВ Li^+ , Ca^{2+} и Mg^{2+} НА ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В АНИОНЕ NbF_7^{2-} В ОБЪЕМНОЙ ФАЗЕ РАСПЛАВА

*Соловьев В.В., д.х.н., проф.; Черненко Л.А., к.х.н.,
Полтавский национальный технический университет имени Юрия Кондратюка,*

Использование только традиционных критериев для оценки характеристик и параметров процесса электровосстановления анионов сложного строения, очевидно, не может дать полную и всестороннюю информацию о термодинамических и кинетических особенностях электрохимического поведения анионов в ионных расплавах. Вместе с тем применение квантовохимического подхода к изучению свойств взаимодействующих частиц расплава привело к созданию теоретико-экспериментальной модели кислотно-основного взаимодействия в нитрат-, карбонат-, титан-, вольфраматсодержащих и других расплавах [1]. Последнее позволяет не только подтверждать результаты полученных экспериментальных закономерностей, но и прогнозировать тенденции в изменении ряда термодинамических и кинетических характеристик электрохимического поведения различных анионов сложного строения.

Ввиду несомненной ценности применения ниобия и соединений на его основе в современных нанотехнологиях, возникает необходимость в создании принципов управления процессами переноса заряда в red-oxi реакциях при синтезе наноматериалов из ниобийсодержащих расплавов. Поэтому в данной работе проведено квантовохимическое обоснование механизма переноса заряда в анионе NbF_7^{2-} под воздействием катионов в ниобийсодержащих расплавах.

Изучение межчастичных взаимодействий в ниобийсодержащих расплавах неэмпирическими квантовохимическими методами проводилось в приближении Хартри–Фока с различными базисными наборами (SBK, MINI), с учетом дополнительных функций, а так же поправок на корреляцию электронов методом MP-2 и многоконфигурационными методами в рамках программного пакета GAMESS/FireFly [2].

Полученные результаты квантовохимического исследования влияния катионного состава расплава на механизм образования электрохимически активных частиц (ЭАЧ) в ниобийсодержащих расплавах [3-5], позволили констатировать возможность образования в объемной фазе расплава катионизированных частиц вида: $M_n^{m+}[NbF_7]^{2-}^{(mn-2)+}$ ($M^{m+}=Li^+$, Ca^{2+} и