

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕСТИЦИДОВ

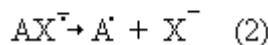
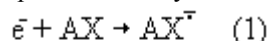
Клюев С.А.

Южное отделение Института океанологии им. П.П. Ширшова РАН, г. Геленджик

Клюев С.А.
Южное отделение
Института океанологии
им. П.П. Ширшова РАН

В данном сообщении рассматриваются хлоросодержащие пестициды, анализ которых часто связан с использованием электронно-захватного детектора (ЭЗД) [1].

ЭЗД стал классическим детектором для молекул, имеющих сильное сродство к электрону, таких как галогенопроизводные углеводородов, среди которых ряд хорошо известных пестицидов [2]. В ЭЗД между молекулами анализируемого вещества и электронами могут протекать следующие процессы:



Анион-радикал (1) является относительно стабильным или же быстро распадается на радикал и анион (2). В связи с этим интересными представляются данные по устойчивости анион-радикалов и энергии акцептирования электронов молекулами.

В данной работе рассчитывались молекулы и анион-радикалы пестицидов (гексахлорбензола (рис. 1), изомеров гексахлорциклогексана (рис. 2) и др.). Использовались программы WinMOPAC и MOPAC 2009. Методы – AM1, PM3 и PM6.

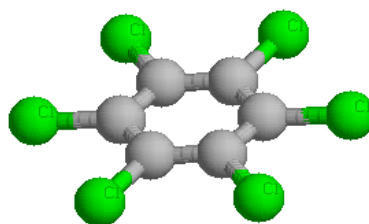


Рис. 1. Молекула гексахлорбензола.

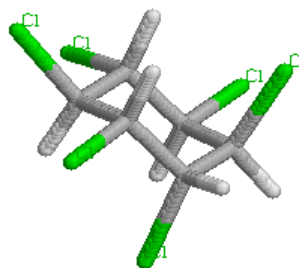


Рис.2. Молекула гексахлорциклогексана..

Результаты расчетов показали, что энергия акцептирования электрона гексахлорбензолом больше, чем его гидрированных аналогов, для которых различия в указанных энергиях малы. В некоторых случаях расчеты приводили к образованию систем, содержащих органический радикал и анион хлора.

Литература

1. *Гишон Ж., Гийемен К.* Количественная газовая хроматография. Москва: "Мир", 1991. Р. 535-546.
2. *Benezet, H., Matsumura F.* Isomerization of gamma-HCH to alpha-HCH in the environment. // Nature . 1973. Р. 480-488.