

UTILIZAREA UNOR MODALITĂȚI MODERNE DE CALCULE CUANTO-CHIMICE A STĂRII ENERGIEI SISTEMELOR MOLECULARE ÎN CURSUL DE CHIMIE

USE OF SOME MODERN MODALITIES OF QUANTUM CHEMICAL CALCULATION OF THE ENERGY STATUS OF MOLECULAR SYSTEMS WITHIN THE CHEMISTRY COURSE

Sergiu CODREANU, lector superior

Ion ARSENE, dr., lector superior

Eduard COROPCEANU, dr., prof. univ. interim.

Catedra Chimie, Universitatea de Stat din Tiraspol

Rezumat. Utilizarea tehnologiilor contemporane în procesul de instruire deschide noi oportunități în formarea și dezvoltarea competențelor profesionale specifice domeniilor, precum și pentru realizarea unor sarcini individuale distincte. Studiile cuanto-chimice a sistemelor energetice și fenomenelor în cadrul cursului de chimie permit înțelegerea profundă a unor aspecte ce țin de starea energetică, configurația spațială, arhitectura moleculară, prognozarea modificărilor moleculare, a proprietăților manifestate etc. Utilizând metodele de studiu cuanto-chimice în baza calculatorului obținem un model interdisciplinar eficient și atractiv de studiu: moleculă/fenomen – suportul tehnologiilor informaționale – studii cuanto-chimice – conștientizarea corelației compoziție-structură-proprietăți → motivare pentru instruire și formarea competențelor specifice chimiei.

Abstract. The use of contemporary technologies in the training process opens up new opportunities in the formation and development of professional competencies specific to the fields, as well as for the achievement of some distinct individual tasks. The quantum-chemical studies of energy systems and phenomena within the Chemistry course allow the deep understanding of some aspects of energy status, spatial configuration, molecular architecture, prognosis of molecular changes, displayed properties etc. Using the computer-based quantum-chemical methods we obtain an efficient and attractive interdisciplinary model of study: the molecule / phenomenon - the support of information technologies - quantum-chemical studies - the consciousness of composition-structure-properties correlation → motivation for training and formation of the competencies specific to Chemistry.

Cuvinte-cheie: tehnologii contemporane, calcule cuanto-chimice, motivare pentru instruire.

Key words: contemporary technologies, quantum-chemical calculations, motivation for training.

Introducere

Procesul educațional contemporan este marcat de implementarea activă a tehnologiilor avansate pentru a studia corpuri, fenomene etc. Disciplina Chimia reprezintă un domeniu cu un grad de dificultate sporit pentru elevii din gimnaziu și liceu. Unul dintre factorii care contribuie la atribuirea acestei discipline la categoria celor dificile și chiar deseori considerate de elevi cu un impact mic asupra formării concepțiilor despre viață poate fi teoretizarea excesivă și posibilitățile reduse de conștientizare a aplicabilității și utilității cunoștințelor acumulate.

Una dintre soluțiile eficiente este argumentarea aplicabilității achizițiilor cognitive în activitatea practică. Efectul este mai productiv dacă este intercalat cu utilizarea tehnologiilor moderne (mai ales aplicate cu ajutorul calculatorului) și poartă un caracter interdisciplinar (spre exemplu: chimie-informatică, chimie-informatică-fizică etc.) [1].

Un mecanism util pentru aplicarea acestor strategii de eficientizare a procesului de instruire sunt calculele cuanto-chimice, care permit celui instruit de a pătrunde în esența unor fenomene, de a înțelege procese în baza legilor fizicii, de a calcula energia unor sisteme, de a prognoza direcția desfășurării unor reacții, mecanismele de substituție etc. Aceste metode pot fi utilizate în procesul de instruire din clasele gimnaziale pentru a forma deprinderi de lucru și a asigura dezvoltarea autonomă a elevilor. Metoda didactică de studiu a moleculelor și fenomenelor din cadrul cursului școlar/universitar, precum și pentru aplicarea unor metode de studiu mai complicate poate fi bazată pe utilizarea mai multor programe, una dintre ele fiind GAMESS, care conține diferite metode de calcul, începând cu cele de dinamică și mecanică moleculară, metode semiempirice, metode *ab initio* bazate pe teoria Hartree-Fock sau metode bazate pe teoria funcționalei de densitate și poate fi folosit pentru calculul unei game foarte largi de proprietăți moleculare [2].

Studiul curent ține de identificarea domeniului de aplicare a unor metode moderne de calcule cuanto-chimice în cadrul cursului preuniversitar de chimie pentru a crea oportunități suplimentare pentru cadrele didactice cu scopul de a oferi disciplinei Chimia un grad de atractivitate mai înalt și a permite aplicarea resurselor informaționale în procesul de instruire.

Calculele cuanto-chimice pot fi utilizate atât în cadrul cursului preuniversitar de chimie anorganică [3], cât și a celui de chimie organică [4], chimie analitică etc. Ca exemplu de aplicare a acestei metode vor fi prezentate calcule în baza unor molecule anorganice (amoniac, acid azotic, peroxid de hidrogen) și organice (acid formic, etan, uree). Metoda este recomandată la nivel opțional pentru învățământul preuniversitar (ore extracurriculare, pentru elevii care manifestă interes sporit față de chimie, programe speciale pentru pregătirea cu scopul de a participa la olimpiade etc.). Pentru nivelul universitar metoda are un grad de aplicabilitate larg.

Metode și materiale aplicate

GAMESS [2] este un pachet de programe moderne folosit pentru calculul structurii electronice a moleculelor. Acest program este folosit de către chimiști, fizicieni, biochimiști, ingineri, medici, etc. pentru investigarea proprietăților structurale sau a celor determinate de structura electronică a moleculelor sau a sistemelor moleculare complexe.

Parametrii geometrici pentru moleculele studiate în configurațiile nucleare respective au fost optimizate *ab initio* folosind metoda SCF în aproximația RHF, utilizând pentru funcțiile atomice baza 6-31*n*. Toate calculele au fost efectuate folosind GAMESS [2]. Structura electronică și geometria moleculelor au fost calculate prin metoda neempirică ROHF/6-31G(d) [5].

În calitate de modele au fost folosite moleculele de amoniac, acid azotic, peroxid de hidrogen, acid formic, etan, uree). A fost studiată atât starea energetică a unor sisteme chimice, cât și profilul energetic al unor reacții intermediare.

Rezultate obținute și discuții


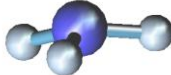
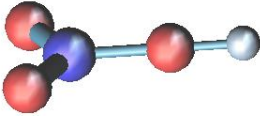
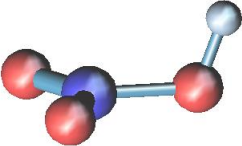
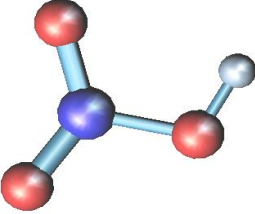
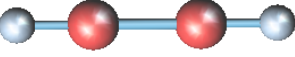
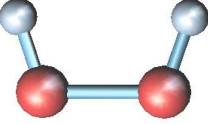
Cu ajutorul metodelor de calcule cuanto-chimice pot fi corelați și prognozați o serie de parametri ce țin de structură moleculară, proprietăți fizice/chimice/biologice etc. Utilizarea metodelor de studii cuanto-chimice în sistemul educațional preuniversitar ar permite crearea unui set de abilități valoroase pentru unii elevi care ar putea ulterior să-și dezvolte propriul stil de cercetare în baza tehnologiilor informaționale, a resurselor electronice care evoluează rapid.

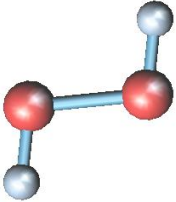
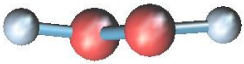
Programul GAMESS poate fi folosit nu numai pentru studiul moleculelor propriuzise, dar și a reacțiilor cu participarea acestora, pentru studiul interacțiunilor intermoleculare, fiind extrem de util în special în cazul speciilor moleculare reactive care sunt dificil sau chiar imposibil de studiat prin metode experimentale. Acest studiu al energiei sistemelor moleculare este în întregime bazat pe calcule cuanto-chimice, precum și prelucrarea lor teoretică, operații care pot fi recomandate cadrelor didactice preuniversitare pentru implementarea în practica profesională. Programul GAMESS efectuează calculele reieșind din datele introduse. În fișierele inițiale sunt introduși toți parametrii programului (exemplul unui asemenea fișier este prezentat mai jos).

```
$contrl scftyp=rhf runtyp=optimize mult=1 icharg=0 $end
$contrl maxit=300 $end
$system memory=10000000 timlim=1200 $end
$basis gbasis=n31 ngauss=6 $end
$guess guess=huckel $end
$scf damp=.true. $end
$data
molecula NH3
Cn 1
N      7.0   0.00   0.00   0.00
H      1.0   1.00   0.00   0.00
H      1.0  -0.50   1.00   0.00
H      1.0  -0.50  -1.00   0.00
$END
```

Folosind acest model au fost efectuate calcule pentru substanțele propuse cu simetriile corespunzătoare speciilor date. În Tabelele 1 și 2 sunt reprezentate structurile și parametrii geometrici ai șirului de molecule studiate: NH₃, HNO₃, H₂O₂, HCOOH, C₂H₆, H₂NCONH₂.

Tabelul 1. Structura moleculelor, energia totală, parametrii geometrici teoretici și experimentali ai unor compuși anorganici.

Nr	Structura	Parametrii geometrici		Energia totală (u.a.e.)
		Calculați	Literatură	
1a	 amoniac (C_{3v})	R(N–H)=0,99 <HNN=120,0		-56,1649
1b	 amoniac (C_{3v})	R(N–H)=0,99 <HNN=116,12	R(N–H)=1,02 <HNN=107,8 [6]	-56,1655
2a	 acid azotic (C_{2v})	R(N=O)=1,21 R(N–O)=1,31 R(O–H)=0,95 <ONO=127,42 <ONO=116,29 <NOH=180 δ ONOH=0		-279,2151
2b	 acid azotic (C_s)	R(N=O)=1,21 R(N–O)=1,37 R(O–H)=0,96 <ONO=128,41 <ONO=115,77 <NOH=109,48 δ ONOH=91,25		-279,2662
2c	 acid azotic (C_1)	R(N=O)=1,22 R(N–O)=1,37 R(O–H)=0,96 <ONO=128,65 <ONO=115,01 <ONO=116,34 <NOH=108,14 δ ONOH=0	R(N=O)=1,21 R(N–O)=1,40 R(O–H)=0,96 <ONO=130,27 <ONO=113,85 <ONO=115,88 <NOH=108,14 δ ONOH=0 [7]	-279,2784
3a	 peroxid de hidrogen ($D_{\infty h}$)	R(O–H)=0,94 R(O–O)=1,33 <OOH=180 δ HOOH=0		-150,4853
3b	 peroxid de hidrogen (C_{2v})	R(O–H)=0,96 R(O–O)=1,46 <OOH=108,38 δ HOOH=0		-150,6918

3c	 <p>peroxid de hidrogen (C_{2h})</p>	$R(O-H)=0,95$ $R(O-O)=1,46$ $\angle OOH=101,18$ $\delta HOOH=180$		-150,7080
3d	 <p>peroxid de hidrogen (C_2)</p>	$R(O-H)=0,95$ $R(O-O)=1,46$ $\angle OOH=101,23$ $\delta HOOH=170,51$	$R(O-H)=0,99$ $R(O-O)=1,46$ $\angle OOH=101,9$ $\delta HOOH=90,2$ [8, 9]	-150,7100

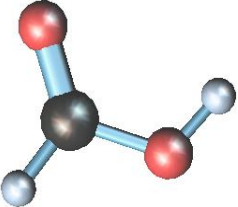
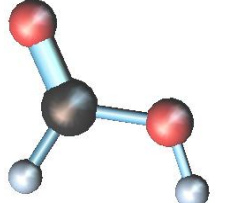
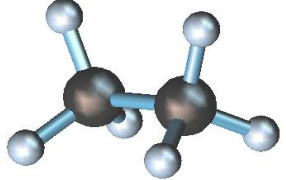
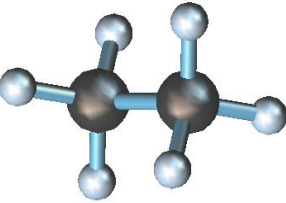
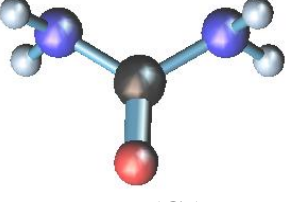
Pentru molecula de amoniac au fost studiate teoretic două forme geometrice cu simetriile respective C_3 și C_{3v} . În cazul simetriei C_3 molecula este planară, iar în cazul simetriei C_{3v} este o piramidă triunghiulară. Analizând din punct de vedere energetic observăm că specia cu simetria mai înaltă (C_{3v}) are o energie mai joasă cu 0,38 kcal/mol, ceea ce ne demonstrează că forma piramidală este mai stabilă decât cea planară. Analizând parametrii geometrici calculați teoretic cu cei din literatură, observăm că aceștia demonstrează o corelare bună [6].

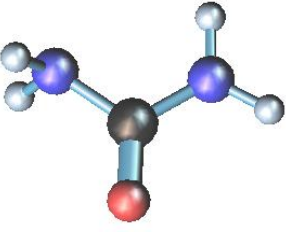
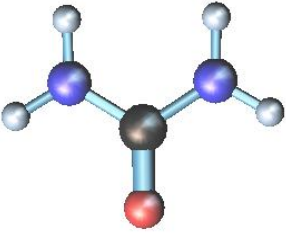
O altă moleculă analizată a fost molecula acidului azotic, pentru care au fost studiate 3 forme geometrice ce se deosebesc prin simetriile C_{2v} , C_s , C_1 (Tabelul 1 (2a, 2b, 2c)). Pentru specia (2c) parametrii geometrici calculați sunt în corelare cu datele din literatură, fiind o configurație planară și mai stabilă față de celelalte două (energia totală este mai mică). Forma (2a) de asemenea este planară, dar aceste două specii (2a și 2c) se deosebesc prin valoarea unghiului $\angle NOH$, care este de 180° și $108^\circ 143'$, respectiv [7].

În cazul peroxidului de hidrogen au fost analizate patru configurații geometrice ce se deosebesc prin simetriile $D_{\infty h}$, C_{2v} , C_{2h} și C_2 (Tabelul 1 (3a, 3b, 3c, 3d)). Calculele cuantice ale moleculei de peroxid de hidrogen, descrise în literatura de specialitate [8, 9], sunt dedicate determinării parametrilor de echilibru geometric și a barierei (*cis*-, *trans*-) pentru rotațiile interne. Analiza întregului potențial adiabetic de energie a moleculei de H_2O_2 , precum și motivele care cauzează reducerea echilibrului simetric al configurației nucleare trebuie totuși luate în considerație. În acest caz investigațiile au început de la cea mai înaltă simetrie posibilă $D_{\infty h}$, au fost analizate distorsiunile planare ale stărilor de tranziție *cis*-(C_{2v}) și *trans*-(C_{2h}), apoi forma de „carte deschisă” (C_2) și s-a demonstrat că la fiecare pas denaturarea moleculei este însoțită de o scădere a simetriei configurației nucleare și o micșorare a energiei totale a configurației respective (Tabelul 1 (3a, 3b, 3c, 3d)). Diferența de energie dintre configurația $D_{\infty h}$ și C_2 este de 141 kcal/mol.

Studiile cuanto-chimice pot fi utilizate cu succes și pentru a stabili energia moleculară a diferitor compuși organici. Ca exemplu pot fi aduse calculele pentru unele molecule organice simple (acid formic, etan, uree – Tabelul 2).

Tabelul 2. Structura moleculelor, energia totală, parametrii geometrici teoretici și experimentali ai unor compuși organici.

Nr	Structura	Parametrii geometrici		Energia totală (u.a.e.)
		Calculați	Literatură	
1a	 acid formic (C_1)	$R(C=O)=1,21$ $R(C-O)=1,34$ $R(C-H)=1,07$ $R(O-H)=0,95$ $\angle HOC=114,92$ $\angle OCO=124,44$ $\angle OCH=124,94$ $\angle HCO=110,62$ $\delta OCOH=0$	$R(C=O)=1,23$ $R(C-O)=1,32$ $R(C-H)=1,1$ $R(O-H)=0,97$ $\angle HOC=106$ $\angle OCO=125$ $\angle OCH=124$ $\angle HCO=111$ $\delta OCOH=0$ [10]	- 188,6655
1b	 acid formic (C_1)	$R(C=O)=1,20$ $R(C-O)=1,35$ $R(C-H)=1,08$ $R(O-H)=0,95$ $\angle HOC=116,66$ $\angle OCO=122,33$ $\angle OCH=122,87$ $\angle HCO=114,79$ $\delta OCOH=0$		- 188,6547
2a	 etan (D_{3h})	$R(C-C)=1,54$ $R(C-H)=1,08$ $\angle CCH=111,12$ $\angle HCH=107,77$ $\delta HCCH=0$		- 79,0614
2b	 etan (D_{3d})	$R(C-C)=1,53$ $R(C-H)=1,08$ $\angle CCH=110,71$ $\angle HCH=108,21$ $\delta HCCH=59,99$	$R(C-C)=1,53$ $R(C-H)=1,10$ $\angle CCH=111,17$ $\angle HCH=109,5$ [11]	- 79,0660
3a	 uree (C_1)	$R(C=O)=1,21$ $R(C-N)=1,42$ $R(N-H)=0,99$ $\angle OCN=121,74$ $\angle CNH=115,64$ $\angle HNH=113,39$ $\delta OCNH=67,98$		- 223,8273

3b	 uree (C_1)	$R(C=O)=1,22$ $R(C-N)=1,35$ $R(N-H)=0,99$ $\angle OCN=123,38$ $\angle CNH=119,67$ $\angle HNH=120,30$ $\delta OCNH=0$ $\delta NCNH=115,59$		- 223,8706
3c	 uree (C_{2v})	$R(C=O)=1,23$ $R(C-N)=1,36$ $R(N-H)=0,99$ $\angle OCN=122,06$ $\angle CNH=123,69$ $\angle HNH=118,80$ $\angle HNC=117,15$ $\delta OCNH=0$	$R(C=O)=1,21$ $R(C-N)=1,38$ $R(N-H)=1,01$ $\angle OCN=123$ $\angle CNH=113,3$ $\angle HNH=114,7$ $\angle HNC=118,0$ [12]	- 223,8906

În cazul moleculei acidului formic din cauza lipsei de simetrie a fost studiată o singură forma structurală cu simetria C_1 . Această moleculă este planară cu atomul de hidrogen legat de oxigen în raza unghiului OCO cu o energie de stabilizare de -188,6655 u.a.e. Comparând parametrii geometrici calculați teoretic cu cei din literatură, observăm că sunt într-o corelare bună [10].

Pentru această moleculă a fost calculată și structura când atomul de hidrogen se află în raza unghiului HCO și observăm că energia este mai înaltă cu 6,67 kcal/mol, adică mai puțin stabilă.

Pentru molecula de etan au fost studiate teoretic două forme geometrice cu simetriile respective D_{3h} și D_{3d} (Tabelul 2 (2a, 2b)). În cazul simetriei D_{3h} atomii de hidrogen simetrici de-a lungul moleculei se află într-un plan (conformație ecranată), iar în cazul simetriei D_{3d} atomii de hidrogen nu sunt într-un plan (conformație intercalată). Din punct de vedere energetic specia cu simetria (D_{3d}) are o energie mai joasă cu 2,88 kcal/mol, comparativ cu cea cunoscută din literatură de 2,90 kcal/mol, ceea ce demonstrează că forma neplanară a atomilor de hidrogen este mai stabilă ca cea planară. Comparând parametrii geometrici calculați teoretic cu cei din literatură, observăm că aceștea prezintă o corelare bună [11].

Molecula de uree a fost studiată teoretic în baza a 3 forme structurale (Tabelul 2, 3a, 3b și 3c.). Analiza comparativă a energiei configurațiilor analizate a scos în evidență, că simetria C_{2v} are cea mai joasă energie. În baza energiilor obținute s-a construit profilul energetic pentru această moleculă (Figura 1).

Realizarea acestor calcule cuanto-chimice permite ca elevii să înțeleagă care dintre formele moleculare studiate are o probabilitate mai mare de existență.

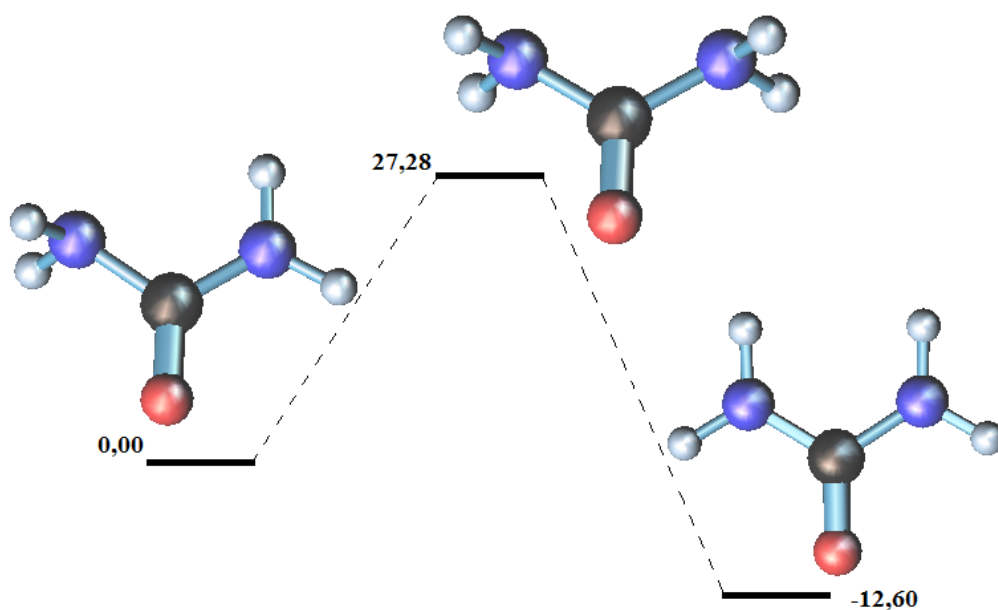


Fig. 1. Profilul energetic pentru molecula de uree.

Utilizarea acestor metode cuanto-chimice de calcul în cadrul orelor cu studenții la disciplinele Chimie cuantică, Modelare computațională în chimie, Tehnologii informaționale aplicate în chimie etc. (specialitățile Chimie, Chimie și biologie) permite formarea abilităților de prelucrare a datelor la calculator, de creare a unor modele moleculare, de dezvoltare a imaginației în domeniul arhitecturii moleculare și analizei moleculei în 3D, studiul proceselor de substituție [13] etc. Este importantă conștientizarea necesității calculelor pentru studiul sistemelor moleculare, însușirea algoritmului de realizare a operațiilor, realizarea sarcinilor individuale pe diferite molecule și în final – dezvoltarea propriilor idei de studiu a unor sisteme moleculare. După însușirea acestor metode, studenții obțin abilități valoroase pentru prelucrarea materialului, elaborarea unor imagini grafice, obținerea datelor noi, elaborarea tezelor de licență/master în conformitate cu standardele înalte din domeniu, iar experiența obținută poate fi aplicată ulterior în activitatea didactică.

De asemenea, cu ajutorul calculelor cuanto-chimice se poate studia profilul energetic al unor reacții intermediare ce au loc în diferite procese, spre exemplu, de descompunere a peroxidului de hidrogen.

Caz concret: reacția radicalică $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{HO}^\bullet = \text{HO}_2^\bullet + \text{H}_2\text{O}$, pentru care a fost analizată interacțiunea peroxidului de hidrogen cu radicalul hidroxil HO^\bullet și conform ecuației reacției s-a studiat profilul energetic [14].

În Figura 2 este prezentat schematic profilul energetic al acestei reacții.

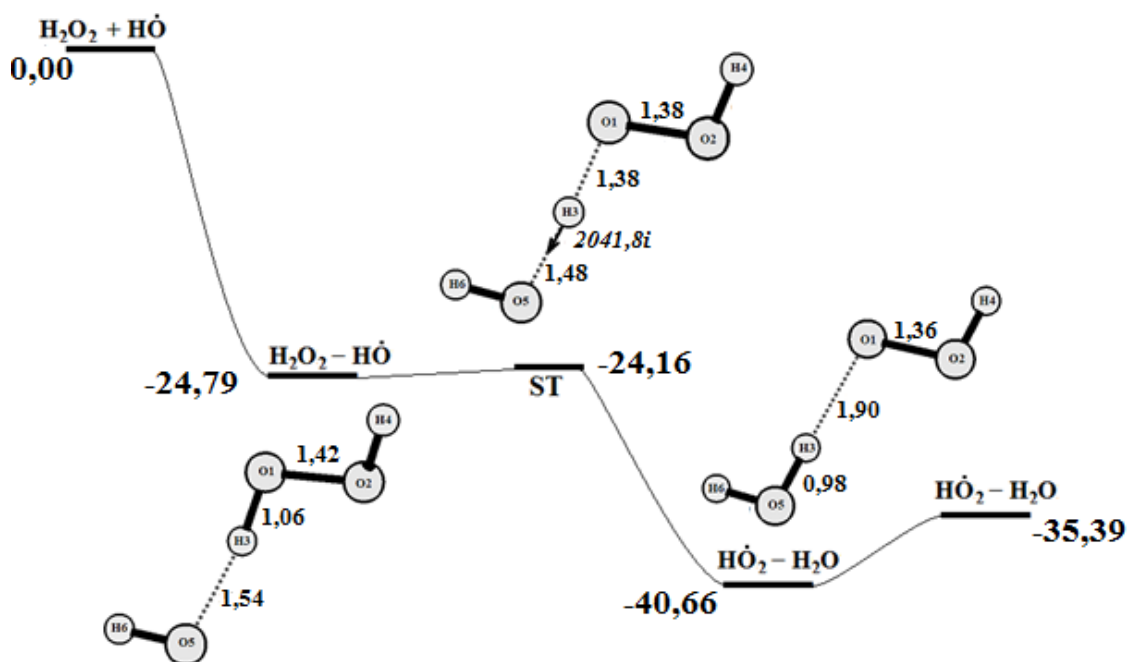


Fig. 2. Profilul energetic de formare a radicalului HO_2^\bullet prin interacțiunea peroxidului de hidrogen cu radicalul HO^\bullet .

Calcululele arată că complexul pre-reacție are o energie de legătură de -24,79 kcal/mol, energia stării de tranziție este de -24,16 kcal/mol, iar complexul post-reacție are o energie de stabilizare de -40,66 kcal/mol. Energia de activare a acestei reacții are o valoare de 0,63 kcal/mol.

Metoda este aplicabilă în cadrul majorității cursurilor din domeniul chimiei. O serie de concepte întâlnite în acest studiu sunt abstracte și operarea cu ele este greu de ilustrat fără modelarea dinamică și colorată, fiind posibilă folosind tehnologiile informaționale. Un profesor de chimie poate transforma o oră monotonă în una atractivă pentru studenți folosind softuri educaționale cu lecții interactive bazate pe modelări 3D, prin care studenții au asigurată înțelegerea logică și profundă a modelării chimice și o învățare eficientă și temeinică, fapt care iese în evidență în procesul de evaluare a studenților, spre exemplu, în cadrul cursului Modelare computațională în chimie, rezultatul manifestându-se prin obținerea rezultatelor înalte comparative cu alte cursuri.

Concluzii

Utilizarea metodelor de calcule cuanto-chimice permite transferul de cunoștințe/tehnologii din domeniul cercetare și implementarea în procesul educațional cu efect pozitiv pentru însușirea mai eficientă a materiei studiate. Stabilitatea moleculei depinde de energia totală a sistemului (cu cât energia este mai mică, cu atât sistemul este mai stabil). Pentru determinarea energiei moleculei se examinează toate conformațiile posibile pentru a identifica cea mai stabilă formă. Acest proces permite elevilor de a analiza diferite variante ale arhitecturii structurale ale moleculelor și a ajunge în baza calculelor cuanto-chimice la modelul optimal. În baza calculelor cuanto-chimice poate fi

determinat profilul energetic al unor reacții chimice, fapt care ne permite o prognoză reală în planul posibilității desfășurării procesului chimic.

Astfel, utilizând metodele de studiu cuanto-chimice în baza calculatorului obținem un model interdisciplinar eficient și atractiv de studiu: moleculă/fenomen – tehnologii informaționale – studii cuanto-chimice – conștientizarea corelației compoziție-structură-proprietăți → motivare pentru instruire și formarea competențelor specifice chimiei.

Bibliografie:

1. Coropceanu E., Rija A., Arsene I., Putină M. Dezvoltarea abilităților de autoformare la chimie în baza unor tehnologii informaționale. În: *Studia universitatis moldaviae. Seria Științe ale educației*, 2014, Nr. 9(79), p. 92-98.
2. Granovsky A. [www http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html) (vizitat 13.04.16).
3. Dragalina G. ș. a. *Chimie, clasa a IX-a*. Chișinău: ARC, 2016.
4. Botnaru M., Roman M., Melentiev E. *Chimie, clasa a XI-a*. Chișinău: Reclama, 2013.
5. Rassolov V.A., Pople J.A., Ratner M.A., Windus T.L. 6-31G* basis set for atoms K through Zn. In: *J. Chem. Phys.* 1998. 109. P. 1223.
6. Cleeton C.E., Williams N.H. Electromagnetic Waves of 1.1 cm (0 in). Wave-Length and the Absorption Spectrum of Ammonia. In: *Physical Review*. 1934, 45(4), p. 234.
7. https://ro.wikipedia.org/wiki/Acid_azotic (vizitat 16.05.17).
8. Ruud B., Laurens J. Theoretical analysis of equilibrium geometries and barriers of rotation in molecules H_2X_2 , with X=O, S, Se, and Te. In: *J. Chem. Phys.*, 1985, 82, p. 3322-3328.
9. Dunning T.H., Winter N.W. Theoretical determination of the barriers to internal rotation in hydrogen peroxide. In: *J. Chem. Phys.*, 1975, 63, p. 1847-1855.
10. Carboxylic acids intranet.tdmu.edu.ua (vizitat 16.05.17).
11. <http://pedrosecadiz.blogspot.md/2015/05/estructuras-moleculares.html> (vizitat 17.05.17).
12. Förstel M. et all. Synthesis of urea in cometary model ices and implications for Comet 67P/Churyumov–Gerasimenko. *Chem. Commun.* 2016, 52, p. 741-744.
13. Коропчану Э.Б., Болога О.А., Арсене И., Витиу А., Булхак И.И., Горинчой Н., Боурош П.Н. Синтез и исследование продуктов внутрисферного замещения в азид-содержащих диоксиматах Со(III). В: *Коорд. химия*, 2016, Т. 42, N 8, с. 480-502.
14. Arsene I. Particularitățile cuanto-chimice ale reacțiilor intermediare în procesul catalitic de descompunere a peroxidului de hidrogen cu participarea compușilor metalelor de tranziție. Teza de doctor, 2017.