

## STUDIUL TEORETIC AL DESCOMPUNERII PEROXIDULUI DE HIDROGEN CU COMPLECȘI DINUCLEARI AI MANGANULUI

*Ion ARSENE*

*Institutul de Chimie al AȘM*

Complecșii dinucleari ai manganului cu L=N,N'-bis(2-piridilmetil)-etilamina manifestă o activitate catalitică ridicată în procesul de descompunere a peroxidului de hidrogen, care decurge în două etape. În această lucrare sunt prezentate datele studiului efectuat în baza Teoriei Funcționalei de Densitate (TFD), la valori diferite ale spinului total, pe doi complecși,  $[(L)_2(Mn(III))_2(CH_3CO_2)_2(OH)_2]^{2+}$  și  $[(L)_2(Mn(IV))_2(CH_3CO_2)_2(O)_2]^{2+}$ , implicați în etapele (I) și (II). Din calcule rezultă că ambele sisteme electronice cu spin înalt au cea mai mică energie. Câștigul general de energie calculat în aceste procese este de -46,56 kcal/mol, fapt ce confirmă caracterul realizabil al acestei reacții.

*Cuvinte-cheie: modelare, TFD, mecanism, peroxid de hidrogen, cataliză, complecși dinucleari, stare de tranziție.*

### THEORETICAL STUDY OF HYDROGEN PEROXIDE DECOMPOSITION BY DINUCLEAR MANGANESE COMPLEXES

Dinuclear manganese based enzymes engage in processes as diverse as hydrogen peroxide disproportionation and  $\alpha$ -amino acid hydrolysis. N,N'-bis(2-pyridylmethyl)-ethylamine dimanganese complexes manifest a high catalytic activity in the hydrogen peroxide decomposition in two stages. In this work the results of *DFT* calculations on two complexes,  $[(L)_2(Mn(III))_2(CH_3CO_2)_2(OH)_2]^{2+}$  and  $[(L)_2(Mn(IV))_2(CH_3CO_2)_2(O)_2]^{2+}$ , involved in steps (I) and (II), different values of the total spin are reported. According to these calculations it results that both systems with high-spin electronic terms have lowest energy. The general energy gain calculated in this processes is -46.56 kcal/mol and this fact confirms the feasibility of this reaction.

*Keywords: modeling, DFT, mechanism, hydrogen peroxide, catalase, dinuclear complexes, transition states.*

*Prezentat la 20.11.2015*

*Publicat: decembrie 2015*