

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ТЕРМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ АЦЕТИЛЕНДИКАРБОКСИЛАТА НИКЕЛЯ

Сапрыкин Р.В.,^а Семёнов С.А.,^а Мусатова В.Ю.,^а Джардималиева Г.И.^б

^аМИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий
им. М.В.Ломоносова, 119454, Москва, проспект Вернадского, 78,
e-mail: romaj47j@gmail.com

^бИнститут проблем химической физики РАН, 142432, Московская обл.,
г. Черноголовка, проспект академика Семенова, 1

Материалы на основе наноразмерных частиц, благодаря своим уникальным физическим и химическим свойствам, находят широкое применение в самых разнообразных областях химии, физики и биологии. В последние годы заметно возрос интерес к карбоксилатам металлов ввиду возможности получать на их основе перспективные нанокompозитные материалы¹. Термолиз металлополимеров и их предшественников предоставляет практически неограниченные возможности для создания всевозможных типов нанокompозитов².

При проведении термоаналитических исследований ненасыщенных дикарбоксилатов никеля в сочетании с масс-спектрометрией в случае ацетилендикарбоксилата никеля на кривых ДСК наблюдается совпадение термических эффектов дегидратации и полимеризации³. Для получения более точных данных о механизме термолиза данного соединения был проведен расчет энергетических характеристик реакций дегидратации и полимеризации с использованием квантово-химических методов.

Расчеты полной энергии дегидратации и полимеризации ацетилендикарбоксилата никеля проводили с использованием программы GAMESS VERSION 11 AUG 201 неэмпирическим методом Хартри-Фока, базис 6-31G.

На основании полученных результатов был сделан вывод, что термическое разложение ацетилендикарбоксилата никеля идет по следующему пути: на первой стадии реализуется процесс отщепления двух молекул воды, затем происходит полимеризация, после чего отщепляется 3-я молекула воды.

Литература

1. Pomogailo A.D., Dzhardimalieva G.I., Kestelman V.N. Macromolecular Metal Carboxylates and their Nanocomposites. – Berlin-Heidelberg: Springer, 2010.– 305p.
2. Помогайло А.Д., Джардималиева Г.И., Розенберг А.С. Успехи химии, 2011, 80, 272.
3. Семенов С.А., Мусатова В.Ю., Дробот Д.В., Джардималиева Г.И. Журн. неорган. химии, 2018, 63, 1195.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты 13-03-00342, 19-03-00237.