



Рисунок 1. Зависимость потери массы от расхода ОЗС.

1. Полиэтилентерефталат (ПЭТФ) // Polymery.ru / Новые технологии переработки пластмасс. 2010. URL: <http://www.polymery.ru/material.php?id=40&sword=%EF%FD%F2%F4> (дата обращения 20.12.2010)

2. Масленников А. О второй жизни ПЭТ// upakovano.ru. URL: <http://www.upakovano.ru/materialsarticles/polymers/1069.php> (дата обращения 20.12.2010)

ВЫБОР МЕТОДА ДЛЯ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО ИЗУЧЕНИЯ МЕХАНИЗМА ВЛИЯНИЯ ТИТАНИЛОВОГО КОМПЛЕКСА ПОРФИРИНА НА ПРОЦЕСС РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА

Сёмина Е.С., Фризен А.К.

Институт органической химии УНЦ РАН

450054, г. Уфа, пр. Октября, д. 71

Поиск новых добавок, позволяющих регулировать радикальную полимеризацию виниловых мономеров, является актуальной задачей. Авторы работы [1] показали, что в качестве такой добавки можно использовать титаниловый комплекс 5,10,15,20-тетракис(3,5-дитретбутилфенил)порфирина (ТТbPPTiO). Однако экспериментальное изучение механизмов взаимодействия этого комплекса с компонентами полимеризата осложнено тем, что добавка вводится в каталитических количествах. В связи с этим актуальным представляется теоретический подход с использованием современных методов квантовой химии.

Одним из критериев при выборе метода для квантово-химического исследования является степень соответствия между геометрическими параметрами молекул, полученными расчетным и экспериментальным путем. Обнаружить в литературе сведения о строении ТТbPPTiO нам не удалось. Поэтому в качестве объекта сравнения ис-

пользован аналогичный комплекс 2,3,7,8,12,13,17,18-октаэтилпорфирина (OERTiO), для которого в [2] приведены рентгеноструктурные данные. Мы выполнили оптимизацию строения этого комплекса двумя различными DFT-методами – B3LYP/6-31G(d) (в программе Firefly QC [3], частично основанной на исходном коде GAMESS (US) [4]) и PBE/3 ζ (программа Priroda-06 [5]). В таблице результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными.

Параметр	Эксп.	PBE/3 ζ			B3LYP/6-31G(d)		
			Δ	$\Delta, \%$		Δ	$\Delta, \%$
Ti-O, Å	1.629	1.636	0.008	0.5	1.614	0.015	0.9
Ti-N, Å	2.140	2.134	0.006	0.3	2.132	0.008	0.4
Ti-плоскость, Å	0.525	0.526	0.001	0.2	0.536	0.011	2.0
O-Ti-N, град	106.0	105.9	0.1	0.1	106.2	2.1	2.0
N-Ti-N, град	84.8	85.7	0.9	1.1	85.6	0.7	0.9

В целом, среднее отклонение геометрических параметров молекулы OERTiO не превысило 0.011Å и 1°. Однако из таблицы видно, что наиболее точным является метод PBE/3 ζ , поэтому он был выбран для дальнейших исследований.

1. Монаков Ю.Б., Койфман О.И., Исламова Р.М., Насретдинова Р.Н., Агеева Т.А. Порфирины и их металлокомплексы в радикальной полимеризации виниловых мономеров // Успехи химии порфиринов. Издательство: Санкт-Петербург НИИ химии СПбГУ. 2007. Т.5. С.293.

2. Lecomte C., Protas J., Guillard R. // C.R.Acad.Sci. Ser.C Chim. 1975. 281. p.921

3. Granovsky A.A., Firefly version 7.1.G, [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)

4. Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. // J.Comput.Chem. 1993. V. 14. № 11. p 1347.

5. Laikov D.N. Priroda, electronic structure code. Version 6. 2006.

Расчеты выполнены с использованием кластерного суперкомпьютера ИОХ УНЦ РАН. Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (госконтракт № 02.740.11.0648).