

Аннотация проекта

«Выяснение природы и структуры парамагнитных частиц радикальной природы, возникающих в процессе функционирования никелевых каталитических систем, методами компьютерного моделирования спектров ЭПР»

Автор проекта: Гуринович Наталья Сергеевна, ассистент химического факультета ИГУ

Каталитические системы Брукхарта позволяют получать продукты полимеризации этилена либо его сополимеризации с другими мономерами с различной длиной полимерной цепи и разветвлённостью, которую можно задавать варьированием дииминового лиганда в составе катализатора. Ключом к получению новых полимеров с определёнными свойствами является исследование процессов, протекающих при функционировании каталитических систем. Поскольку данные процессы протекают с образованием, превращением и разрушением парамагнитных частиц, для исследования широко применяется спектроскопия ЭПР. Для обработки полученных данных необходимо пользоваться аппаратом квантовой механики и методами компьютерного моделирования.

Целью данной работы является поиск и подбор оптимального программного обеспечения и оптимальных методов квантовохимических расчётов спектров ЭПР каталитических систем полимеризации этилена, сформированных на основе комплексов никеля с дииминовыми лигандами, активированных алюминийорганическими соединениями.

В работе планируется:

1. Исследование возможностей программного обеспечения EasySpin для моделирования спектров радикальных парамагнитных частиц, образующихся в каталитических системах брукхартовского типа;
2. Сравнение возможностей EasySpin и программного обеспечения за авторством В. В. Сараева с целью выяснить, какое из них эффективнее и выгоднее может быть использовано применительно к исследуемым системам.