

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ГЕОМЕТРИИ АЛКОКСИ(ГИДРОКСИ)(ЭТИЛАЦЕТОАЦЕТАТ)- АЛЮМОКСАНА

© 2021 г. Г. И. Щербакова^а, М. К. Шаухин^б, А. Д. Кирилин^б,
П. А. Стороженко^а, А. С. Похоренко^{а,*}

^а Государственный научно-исследовательский институт химии и технологии элементоорганических соединений,
ш. Энтузиастов 38, Москва, 105118 Россия

^б МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий
имени М.В. Ломоносова, Москва, 119454 Россия

*e-mail: anastasiyapohorenko@yandex.ru

Поступило в Редакцию 8 декабря 2020 г.

После доработки 25 декабря 2020 г.

Принято к печати 30 декабря 2020 г.

С использованием методов самосогласованного поля (метод Хартри–Фока) и полуэмпирического RM3 в программном комплексе NucleusChem 6.01 рассчитаны геометрические параметры двух вероятных молекулярных структур аморфного олигомера алкокси(гидрокси)(этилацетоацетат)алюмоксана, приведены длины связей, валентные углы и результаты квантово-химического расчета полной энергии.

Ключевые слова: олигомерный алкокси(гидрокси)(этилацетоацетат)алюмоксан, молекулярная структура, квантово-химический расчет

DOI: 10.31857/S0044460X21020128

Синтезированные в Государственном научно-исследовательском институте химии и технологии элементоорганических соединений хелатированные алкокси(гидрокси)алюмоксановые олигомеры [1–3], в частности алкокси(гидрокси)(этилацетоацетат)алюмоксаны, могут служить предшественниками высокочистых компонентов (связующих, покрытий, порошков и т. п.) для получения алюмооксидных керамокомпозитов [1–6]. Развитие представлений о их структуре и молекулярной организации может обеспечить проведение синтеза олигомеров с оптимальной структурой.

Органоалюмоксановые олигомеры – сложные объекты для исследования, в зависимости от способов их получения и природы лигандов они могут находиться в различных легко циклизующихся и сшивающихся структурных формах [1–3]. Группой американских ученых выполнены рентгенографические исследования ряда кристалличе-

ских *трет*-бутилалюмоксанов: $[(t\text{-Bu})\text{Al}(\mu_3\text{-O})]_8$, $[(t\text{-Bu})_2\text{Al}\{\mu\text{-O}\}\text{Al}(t\text{-Bu})_2]_2$, $[(t\text{-Bu})\text{Al}(\mu_3\text{-O})]_6$, $[(t\text{-Bu})\text{Al}(\mu_3\text{-O})]_7$ и др. [7–9]. Их молекулы построены из четырехчленных (Al_2O_2) и шестичленных (Al_3O_3) циклов со степенью координации атома Al 4, т. е. внутренняя структура *трет*-бутилалюмоксанов подобна фрагменту структуры минерала бемита $[\text{Al}(\text{O})(\text{OH})]_n$ [10]. Отмечалась особая роль алюмоксанов в качестве универсальных предшественников для создания алюмооксидной керамики [11–16].

Проведены рентгенографические исследования кристаллических карбоксилатов *трет*-бутилалюмоксанов – продуктов взаимодействия *трет*-бутилалюмоксанов с бензойной и др. кислотами [17–22].

В отличие от кристаллических *трет*-бутилалюмоксанов, синтезированные нами алкокси(гидрокси)(этилацетоацетат)алюмоксановые ($\text{RO} =$

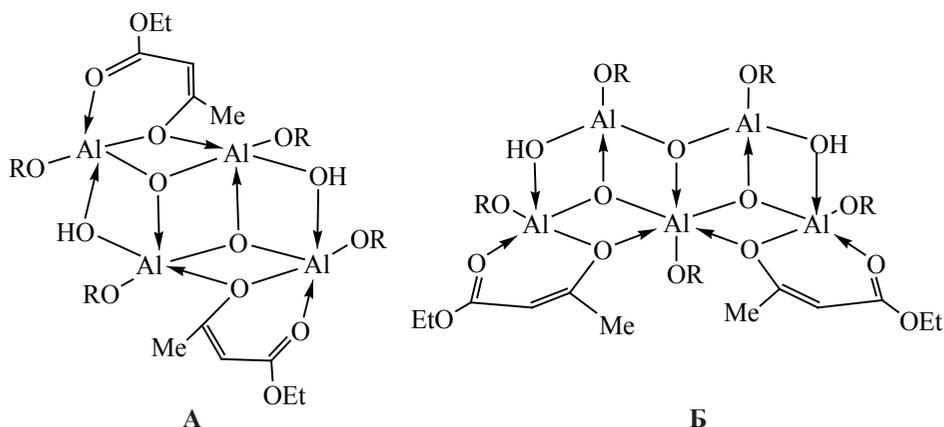


Рис. 1. Вероятная структура расчетных фрагментов олигомера гидрокси(этилацетоацетат)(этоксид)алюмоксана.

EtO, *i*-PrO, *i*-BuO) олигомеры рентгеноаморфны и состоят из молекул, различающихся по составу и строению [1–3]. На основании детальных физико-химических исследований (^1H , ^{13}C , ^{27}Al ЯМР, ИК спектроскопия, масс-спектрометрия, ГПХ, криоскопия, ТГА, элементный анализ) была предложена вероятная схема образования таких олигомеров [1], рассчитаны более 100 эмпирических формул для возможных олигомерных молекул и представлено их вероятное строение [2].

Современные компьютерные методы расчета неэмпирической и полуэмпирической квантовой химии позволяют с высокой вероятностью предсказать строение соединений и определить термодинамически стабильные молекулярные структуры [23–25].

Моделирование геометрии и квантово-химический расчет полной энергии подобных олигомерных молекул ранее не проводились, поэтому были выбраны наиболее простые олигомерные фрагменты (рис. 1) [2, 3], из которых состоит олигомер, полученный в результате последовательного гидролиза и алкоголиза диэтил(этоксид)алюминия в присутствии енольной формы ацетоуксусного эфира (ROH) (схема 1).

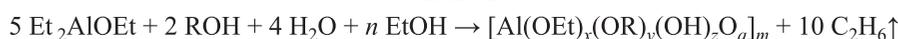
Результаты спектроскопических исследований (^1H , ^{13}C , ^{27}Al ЯМР и ИК спектроскопия) подтвер-

ждают присутствие структурных фрагментов в полученном аморфном олигомерном гидрокси(этилацетоацетат)(этоксид)алюмоксане. В спектрах ЯМР ^1H олигомера $[\text{Al}(\text{OEt})_x[\text{OC}(\text{Me})=\text{CHC}(\text{O})\text{OEt}]_y(\text{OH})_z\text{O}_q]_m$ наблюдаются сигналы метильных протонов этоксигрупп при 0.5–1.5 м. д., метильных групп при 1.7–2.0 м. д., метиленовых групп при 3.2–4.5 м. д., протонов в группах $\text{CH}=\text{}$ при 4.8–5.1 м. д. В спектрах ЯМР ^{13}C присутствуют сигналы атомов углерода при 14–20 (CH_2CH_2), 24–26 ($\text{CH}_3\text{C}=\text{}$), 55–60 (OCH_2), 172–175 (COO) и 184–189 ($\text{C}=\text{O}$) м. д. В спектрах ЯМР ^{27}Al концентрированных и разбавленных растворов олигомера обнаружены сигналы при 55.0–80.0, 30.0–45.0 и 0.0–10 м. д., принадлежащие атомам алюминия с координацией 4, 5, 6 соответственно.

В ИК спектрах олигомера наблюдаются полосы (cm^{-1}): 615, 660 $\nu(\text{Al}-\text{O}_6)$, 861 $\nu(\text{Al}-\text{O}-\text{Al})$, 981 $\nu(\text{Al}-\text{O}_4)$, 1021, 1066 $\nu(\text{Al}-\text{O}-\text{C})$, 785, 1118, 1177, 1308, 1372, 1390, 1422 $\delta\{\text{CH}, \text{C}(\text{CH}_3)\}$ и $\nu(\text{C}-\text{O})$, 1533 $\nu(\text{C}=\text{C})$, 1635 $\nu(\text{C}=\text{O})$, координационно связанная с атомом Al, 2925, 2976 $\nu(\text{C}-\text{H})$, 3374 $\nu(-\text{OH})$.

Данные элементного и термогравиметрического анализов олигомера $[\text{Al}(\text{OEt})_x[\text{OC}(\text{Me})=\text{CHC}(\text{O})\text{OEt}]_y(\text{OH})_z\text{O}_q]_m$ хорошо совпадают с усредненным значением по элементному составу для выбранных нами олигомерных фрагментов А, Б (рис. 1,

Схема 1.



$$m = 4 - 5; x + y + z + 2q = 3; \text{R} = \text{C}(\text{Me})=\text{CHC}(\text{O})\text{OEt}.$$

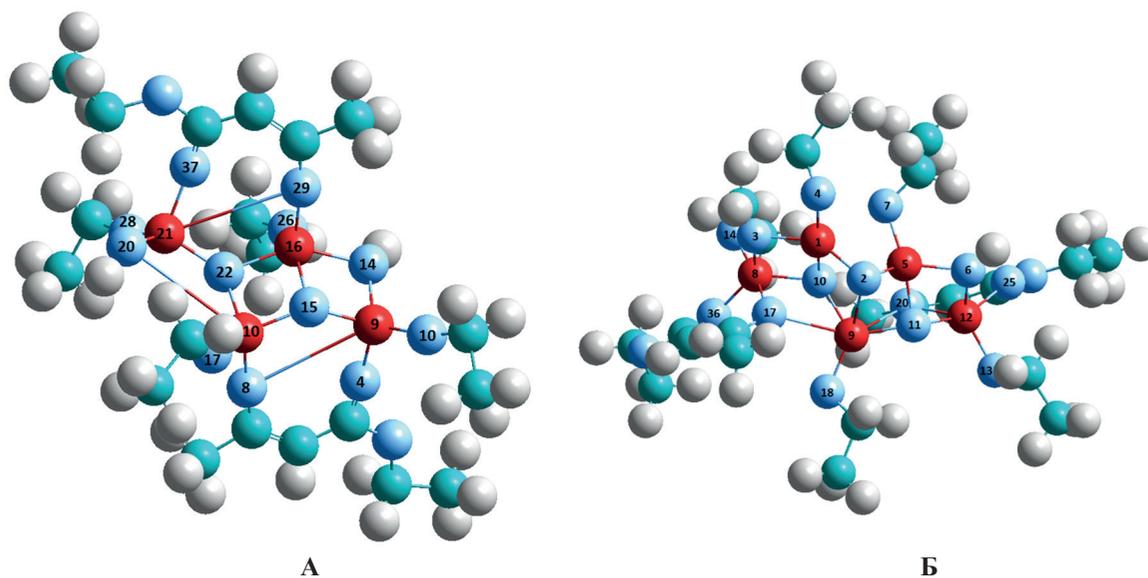


Рис. 2. Молекулярная структура основных олигомерных фрагментов гидрокси(этилацетоацетат)(этокси)алюмоксана: **А** – $C_{20}H_{40}Al_4O_{14}$ (Al – №№ 9, 10, 16, 21; O – атомы, обозначенные остальными номерами), **Б** – $C_{22}H_{45}Al_5O_{16}$ (Al – №№ 1, 5, 8, 9, 12; O – остальные номера).

табл. 1). Рассчитанная молекулярная структура двух фрагментов аморфного олигомера представлена на рис. 2.

Моделирование геометрии двух молекулярных структур аморфного олигомерного гидрокси(этилацетоацетат)(этокси)алюмоксана проводили с использованием методов самосогласованного поля (метод Хартри–Фока) и полуэмпирического PM3 в программном комплексе HyperChem 6.01 [26].

Поиск оптимальных структур – расчеты основных структурных параметров молекул (длины связи и валентные углы) (табл. 2, 3), расчет полной энергии (табл. 4) двух вероятных молекул олигомера проводили в первом приближении с применением валентно расщепленного базиса 3-21G, входящего в стандартный набор базисов HyperChem

(STO-3G, 3-21G, 6-31G* и 6-31G**). Выбор базиса 3-21G обусловлен тем, что базис STO-3G не смог бы адекватно описать структуру с множественными координационными связями в молекуле (рис. 1), а базисы 6-31G* и 6-31G** потребовали бы значительных вычислительных ресурсов.

В ранее опубликованных работах [10, 27] было показано, что базис 3-21G дает хорошее описание геометрии (длин связей Al–O и углов AlOC, AlOAl) алкоксидов алюминия, карбоксилатов алюмоксанов и др., а использование более крупного базисного набора 6-31G* не приводит к значительному изменению предсказанной геометрии [27].

Таким образом, нами осуществлена визуализация двух ранее предложенных [2, 3] олигомерных фрагментов гидрокси(этилацетоацетат)-

Таблица 1. Результаты элементного и термогравиметрического анализов олигомера гидрокси(этилацетоацетат)(этокси)алюмоксана и эмпирические формулы основных олигомерных фрагментов **А**, < (1:1)

Фрагмент	Формула	Химический состав, мас%				с, мас% (ТГА)
		С	Н	Al	ОН	Al ₂ O ₃
А	[Al(OEt) _x (OR) _y (OH) _z O _q] _m	38.08	6.78	18.52	6.20	35.09
	Найдено					
	Вычислено					
А	C ₂₀ H ₄₀ O ₁₄ Al ₄	39.22	6.54	17.65	5.56	33.33
Б	C ₂₂ H ₄₅ O ₁₆ Al ₅	37.71	6.43	19.29	4.86	36.43
	Усредненное значение	38.47	6.49	18.47	5.21	34.89

Таблица 2. Основные рассчитанные длины связей Al–O и валентные углы в молекуле C₂₀H₄₀Al₄O₁₄ (А)

Связь	Длина связи, Å		Валентный угол, град		
	3-21G	PM3	Угол	3-21G	PM3
Al ⁹ –O ^{4a}	1.765	1.833	O ⁸ Al ⁹ O ¹⁵	49.2	50.9
Al ⁹ –O ⁸	3.523	2.558	O ⁸ Al ⁹ O ¹¹	136.9	139.2
Al ⁹ –O ¹¹	1.661	1.772	Al ⁹ O ¹⁵ Al ¹⁰	140.6	141.5
Al ⁹ –O ^{14a}	1.772	1.809	Al ¹⁶ O ¹⁴ Al ⁹	98.0	96.1
Al ⁹ –O ¹⁵	1.730	1.777	O ¹⁵ Al ¹⁰ O ¹⁷	124.5	121.4
Al ¹⁰ –O ^{8a}	1.764	1.874	C ⁶ O ⁸ Al ⁹	111.1	122.9
Al ¹⁰ –O ¹⁵	1.739	1.823	O ¹⁵ Al ¹⁰ O ²⁰	122.2	111.4
Al ¹⁰ –O ¹⁷	1.682	1.771	O ¹⁷ Al ¹⁰ O ²⁰	70.3	123.5
Al ¹⁰ –O ²⁰	3.640	1.802	O ¹¹ Al ⁹ O ¹⁵	125.6	117.2
Al ¹⁰ –O ^{22a}	1.764	2.470	O ¹⁷ Al ¹⁰ O ²²	120.3	133.1
Al ¹⁶ –O ¹⁴	1.930	1.884	O ²⁹ Al ²¹ O ²²	52.3	74.8
Al ¹⁶ –O ^{15a}	1.885	1.837	O ²⁶ Al ¹⁶ O ¹⁵	139.9	134.9
Al ¹⁶ –O ²²	1.874	1.765	O ²⁹ Al ²¹ O ²³	130.0	123.9
Al ¹⁶ –O ²⁶	1.737	1.786	O ²⁶ Al ¹⁶ O ¹⁴	86.2	86.9
Al ¹⁶ –O ^{29a}	1.762	2.592	CO ²⁹ Al ²¹	109.9	112.1
Al ²¹ –O ^{20a}	1.729	2.502	Al ¹⁰ O ²⁰ Al ²¹	62.3	121.3
Al ²¹ –O ²²	1.742	1.746	O ²³ Al ²¹ O ²²	115.6	139.7
Al ²¹ –O ²³	1.688	1.771	Al ²¹ O ²² Al ¹⁶	126.6	123.8
Al ²¹ –O ²⁹	3.600	1.832	O ²² Al ¹⁶ O ²⁶	99.9	134.0
Al ²¹ –O ^{37a}	1.787	1.851	O ²² Al ¹⁶ O ¹⁴	147.4	131.8

Таблица 3. Основные рассчитанные длины связей Al–O и валентные углы в молекуле C₂₂H₄₅Al₅O₁₆ (Б)

Связь	Длина связи, Å		Валентный угол, град		
	3-21G	PM3	Угол	3-21G	PM3
Al ¹ –O ⁴	1.673	1.783	O ⁴ Al ¹ O ³	113.2	94.3
Al ¹ –O ²	1.700	1.781	O ³ Al ¹ O ¹⁰	81.9	85.4
Al ¹ –O ³	1.822	1.853	O ¹⁰ Al ¹ O ²	104.5	80.4
Al ¹ –O ^{10a}	1.790	1.888	O ² Al ¹ O ⁴	121.3	105.8
Al ⁵ –O ²	1.700	1.781	O ⁷ Al ⁵ O ⁶	113.2	111.4
Al ⁵ –O ⁶	1.823	1.846	O ⁶ Al ⁵ O ¹¹	82.0	74.9
Al ⁵ –O ⁷	1.673	1.790	O ¹¹ Al ⁵ O ²	105.1	91.2
Al ⁵ –O ^{11a}	1.793	1.803	O ¹¹ Al ⁵ O ⁷	118.6	153.2
Al ⁸ –O ^{3a}	1.822	1.822	O ¹⁰ Al ⁸ O ³	80.6	86.9
Al ⁸ –O ¹⁰	1.838	1.867	O ¹⁷ Al ⁸ O ¹⁰	78.4	67.3
Al ⁸ –O ¹⁴	1.704	1.792	O ³⁶ Al ⁸ O ¹⁷	85.3	96.6
Al ⁸ –O ¹⁷	1.905	1.873	O ³⁶ Al ⁸ O ¹⁴	97.2	83.5
Al ⁸ –O ^{36a}	1.878	1.863	O ³⁶ Al ⁸ O ³	90.1	137.3
Al ⁹ –O ^{2a}	3.313	2.363	O ¹⁷ Al ⁹ O ¹⁰	77.7	53.3
Al ⁹ –O ^{10a}	1.759	1.830	O ¹⁷ Al ⁹ O ¹⁸	95.8	83.6
Al ⁹ –O ¹¹	1.764	1.796	O ¹⁸ Al ⁹ O ²⁰	93.5	117.6
Al ⁹ –O ¹⁷	2.001	2.564	O ²⁰ Al ⁹ O ²	85.4	102.1
Al ⁹ –O ¹⁸	1.732	1.766	O ²⁰ Al ⁹ O ¹¹	78.0	49.9
Al ⁹ –O ^{20a}	1.969	2.612	O ¹¹ Al ⁹ O ¹⁰	113.2	111.1
Al ¹² –O ^{6a}	1.820	1.836	O ²⁰ Al ¹² O ¹¹	78.1	65.5
Al ¹² –O ¹¹	1.841	1.839	O ¹¹ Al ¹² O ⁶	80.8	74.2
Al ¹² –O ¹³	1.708	1.787	O ⁶ Al ¹² O ²⁵	91.0	89.1
Al ¹² –O ²⁰	1.897	1.862	O ²⁵ Al ¹² O ¹³	96.0	92.7
Al ¹² –O ^{25a}	1.876	1.888	O ²⁵ Al ¹² O ²⁰	85.2	104.3

Таблица 4. Полные энергии молекул **А** и **Б** (ат. ед.), рассчитанные методом Хартри–Фока в стандартных базисах

Базис	$C_{20}H_{40}Al_4O_{14}$ (А)	$C_{22}H_{45}Al_5O_{16}$ (Б)
STO-3G	-2624.279	-2683.271
3-21G	-2782.189	-3250.114
6-31G*	-2797.227	-2808.810
6-31G**	-2797.305	-3267.730

(этоксид)алюмоксана. Рассчитаны длины связей и валентные углы для двух вероятных молекулярных структур аморфного олигомера и проведен квантово-химический расчет полной энергии избранных молекулярных структур.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

ИК спектры олигомера $[Al(OEt)_x[OC(Me)=CHC(O)OEt]_y(OH)_zO_q]_m$ регистрировали на приборе Nicolet iS50R в интервале 400–4000 cm^{-1} с помощью универсальной приставки однократного НПВО Smart iTR (кристалл – алмаз). Спектры ЯМР на ядрах 1H , ^{13}C , ^{27}Al измеряли для растворов в дейтерохлороформе ($CDCl_3$) на спектрометре ЯМР AVANCE-600 Bruker (600.13 МГц, внешний эталон – $[Al(H_2O)_6]^{3+}$). Алюминий определяли трилонометрическим методом, углерод и водород – гравиметрическим методом, сжигая навески в токе кислорода на газоанализаторе Eurovector EA3000. Количество гидроксильных групп определяли газометрическим методом. Термогравиметрический анализ (ТГА) олигомера $[Al(OEt)_x[OC(Me)=CHC(O)OEt]_y(OH)_zO_q]_m$ проводили на приборе TGA/SDTA 851 Mettler Toledo со скоростью нагрева 10 град/мин до 1100°C в атмосфере воздуха.

ФОНДОВАЯ ПОДДЕРЖКА

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного научно-исследовательского института химии и технологии элементоорганических соединений.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Стороженко П.А., Щербакова Г.И., Цирлин А.М. Муркина А. С., Варфоломеев М. С., Кузнецова М. Г., Полякова М. В., Трохаченкова О. П. // Неорг. матер. 2007. Т. 43. № 3. С. 373; Storozhenko P.A., Shcherbakova G.I., Tsirlin A.M., Murkina A.S.,

Varfolomeev M.S., Kuznetsova M.G., Polyakova M.V., Trokhachenkova O. P. // Inorg. Mater. 2007. Vol. 43. N 3. P. 320. doi 10.1134/s002016850703020x

2. Щербакова Г.И. Автореф. дис. ... докт. хим. наук. Москва, 2009. 50 с.
3. Щербакова Г.И., Стороженко П.А., Жигалов Д.В. Варфоломеев М.С., Блохина М.Х., Кутинова Н.Б. // Изв. АН. Сер. хим. 2020. Т. 69. № 5. С. 875; Shcherbakova G.I., Storozhenko P.A., Zhigalov D.V., Varfolomeev M.S., Blokhina M.Kh., Kutinova N.B. // Russ. Chem. Bull. 2020. Vol. 69. N 5. P. 875. doi 10.1007/s11172-020-2844-1
4. Абакумов Г.А., Пискунов А.В., Черкасов В.К., Федюшкин И.Л., Анаников В.П., Еремин Д.Б., Гордеев Е.Г., Белецкая И.П., Аверин А.Д., Бочкарев М.Н., Трифонов А.А., Джемилев У. М., Дьяконов В.А., Егоров М.П., Верещагин А.Н., Сыроешкин М.А., Жуйков В.В., Музафаров А.М., Анисимов А.А., Арзуманян А.В., Кононович Ю.Н., Темников М.Н., Синяшин О.Г., Будникова Ю.Г., Бурилов А.Р., Карасик А.А., Миронов В.Ф., Стороженко П.А., Щербакова Г.И., Трофимов Б.А., Амосова С.В., Гусарова Н.К., Потанов В.А., Шур В.Б., Бурлаков В.В., Богданов В.С., Андреев М.В. // Усп. хим. 2018. Т. 87. С. 393; Abakimov G.A., Piskunov A.V., Cherkasov V.K., Fedushkin I.L., Ananikov V.P., Eremin D.B., Gordeev E.G., Beletskaya I.P., Averin A.D., Bochkarev M.N., Trifonov A.A., Dzhemilev U.M., Dyakonov V.A., Egorov M.P., Vereshchagin A.N., Syroeshkin M.A., Zhuikov V.V., Muzafarov A.M., Anisimov A.A., Arzumanyan A.V., Kononovich Yu.N., Temnikov M.N., Sinyashin O.G., Budnikova Yu.H., Burlakov A.R., Karasik A.A., Mironov V.F., Storozhenko P.A., Shcherbakova G.I., Trofimov B.A., Amosova S.V., Gusarova N.K., Potapov V.A., Shur V.B., Burlakov V.V., Bogdanov V.S., Andreev M.V. // Russ. Chem. Rev. 2018. Vol. 87. N 5. P. 393. doi 10.1070/RCR4795
5. Варфоломеев М.С., Моисеев В.С., Щербакова Г.И., Стороженко П.А., Шатунов В.В. // Неорг. матер. 2015. Т. 51. № 1. С. 86. doi 10.7868/S0002337X15010200; Varfolomeev M.S., Moiseev V.S., Shcherbakova G.I., Storozhenko P.A., Shatunov V.V. // Inorg. Mater. 2015. Vol. 51. N 1. P. 76. doi 10.1134/S0020168515010203

6. Баранова Т.Ф., Валиахметов С.А., Гоголев Г.В., Шункина Н.И., Варфоломеев М.С., Щербакова Г.И., Вартанян Г.А. // Новые огнеупоры. 2016. № 8. С. 3; Baranova T.F., Valiakhmetov S.A., Gogolev G.V., Shunkina N.I., Varfolomeev M.S., Shcherbakova G.I., Vartanyan G.A. // Refractories Industrial Ceramics. 2016. Vol. 57. N 4. P. 3. doi 10.1007/s11148-016-9981-y
7. Mason M.R., Smith J.M., Bott S.G., Barron A.R. // J. Am. Chem. Soc. 1993. Vol. 115. P. 4971. doi 10.1021/ja00065a005
8. Harlan C.J., Mason M.R., Barron A.R. // Organometallics. 1994. Vol. 13. P. 2957. doi 10.1021/om00020a011
9. Landry C.C., Harlan C.J., Bott S.G., Barron A.R. // Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 1995. Vol. 34. P. 1202. doi 10.1002/anie.199512011
10. Bethley C.E., Aitken C.L., Koide Y., Harlan C.J., Bott S.G., Barron A.R. // Organometallics. 1997. Vol. 16. P. 329. doi 10.1021/om960576q
11. Apblett A.W., Landry C.C., Mason M.R., Barron A.R. // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 1992. Vol. 249. P. 75. doi 10.1557/PROC-249-75
12. Callender R.L., Harlan C.J., Shapiro N.M., Jones C.D., Callahan D.L., Wiesner M.R., Cook R., Barron A.R. // Chem. Mater. 1997. Vol. 9. N 11. P. 2421. doi 10.1021/cm9703684
13. Shafi K.V.P.M., Ulman A., Lai J., Yang N.-L., Cui M.-H. // J. Am. Chem. Soc. 2003 Vol. 125. N 14. P. 4010. doi 10.1021/ja0213625
14. Vogelson C.T., Koide Y., Cook R., Bott S.G., Alemany L.B., Barron A.R. // Chem. Mater. 2000. Vol. 12. P. 795. doi 10.1021/cm990648e
15. Ji L., Lin J., Tan K.L., Zeng H.C. // Chem. Mater. 2000. Vol. 12. N 4. P. 931. doi 10.1021/cm990404u
16. DeFriend K.A., Wiesner M.R., Barron A.R. // J. Membr. Sci. 2003. Vol. 224. N 1–2. P. 11. doi 10.1016/s0376-7388(03)00344-2
17. McMahon C.N., Francis J.A., Bott S.G., Barron A.R. // J. Chem. Soc. Dalton Trans. 1999. P. 67. doi 10.1039/A806350H
18. Aitken C.L., Barron A.R. // J. Chem. Cryst. 1996. Vol. 26. P. 293. doi 10.1007/BF01677784
19. Barron A.R. // Polyhedron. 1995. Vol. 14. P. 3197. doi 10.1016/0277-5387(95)85006-6
20. Van Poppel L.G., Bott S.G., Barron A.R. // J. Chem. Cryst. 2001. Vol. 31. P. 417. doi 10.1023/A:1015627502327
21. Harlan C.J., Bott S.G., Wu B., Lenz R.W., Barron A.R. // Chem. Commun. 1997. P. 2183. doi 10.1039/A705437H
22. Koide Y., Barron A.R. // Organometallics. 1995. Vol. 14. P. 4026. doi 10.1021/om00008a060
23. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. 495 с.
24. Atkins P.W., Friedman R.S. Molecular quantum mechanics. New York: Oxford University Press Inc., 2005. 565 p.
25. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. М.: СОЛОН-Пресс, 2005. С. 303.
26. HyperChem release 6.01 for Windows, Molecular Modeling System, 2000, Hypercube, Inc.
27. Barron A.R., Dobbs K.D., Francl M.M. // J. Am. Chem. Soc. 1991. Vol. 113. P.39. doi 10.1021/ja00001a007

Quantum-Chemical Calculation of Alkoxy(hydroxy)(ethyl acetoacetate)alumoxane Geometry

G. I. Shcherbakova^a, M. K. Shaukhin^b, A. D. Kirilin^b,
P. A. Storozhenko^a, and A. S. Pokhorenko^{a,*}

^a State Research Institute for Chemistry and Technology of Organoelement Compounds, Moscow, 105118 Russia

^b MIREA – Russian Technological University, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technology,
Moscow 119454, Russia

*e-mail: anastasiyapohorenko@yandex.ru

Received December 8, 2020; revised December 25, 2020; accepted December 30, 2020

Using self-consistent field methods (Hartree–Fock method) and semiempirical PM3 in the HyperChem 6.01 software package, the geometric parameters of two probable molecular structures of amorphous alkoxy(hydroxy)(ethyl acetoacetate)alumoxane were calculated. Bond lengths, valance angles, and the results of quantum-chemical calculations of the total energy for two molecular structures of amorphous alkoxy(hydroxy)(ethyl acetoacetate)alumoxane were presented.

Keywords: alkoxy(hydroxy)(ethyl acetoacetate)alumoxane oligomer, molecular structure, quantum-chemical calculation