Секция «Химия»

Сравнительная характеристика металлополимерных комплексов поливинилпирролидона с никелем и медью

Джабиева С.А.[1], *Рагимли Н.Т.*[2]

1 - Институт катализа и неорганической химии имени академика М. Нагиева, Баку, Азербайджан, *E-mail: sarha@list.ru*; 2 - Институт катализа и неорганической химии имени академика М. Нагиева, Баку, Азербайджан, *E-mail: narciss.rehim93@mail.ru*

Металлополимерные нанокомпозиты обладают существенными преимуществами, благодаря чему нашли применение в различных областях химии таких как катализ, оптика, электроника, биомедицина и др. [1]. Исходя из этого, многие научные и промышленные сообщества сосредоточились на синтезе металлополимерных нанокомпозитов и поиске инновационных подходов для описания этих систем с целью разработки новых более эффективных продуктов [2].

В настоящей работе были синтезированы полимер-металлические нанокомпозиты никеля и меди. В качестве полимерного носителя выбран поливинилпирролидон (ПВП). Полученные образцы были изучены при помощи методов ИК-спектроскопии и рентгеновской дифракции. Исходя из ИК-спектров образцов было подтверждено получение комплексов. Анализ дифрактограммы показал присутствие металла на поверхности полимера. Для более подробного анализа нами были изучены предполагаемые структуры комплексов ПВП-Ni и ПВП-Cu квантово-химическими методами расчета. Были оптимизированы мономерные фрагменты ПВП с соответствующими переходными металлами при помощи теории функционала плотности (ТФП) с базисным набором LANL2DZ. Проанализированы электронные характеристики комплексов. На основе энергий высших занятых и низших свободных молекулярных орбиталей (ВЗМО и НСМО) были рассчитаны энергетический зазор (E_{gap}), энергия сродства к электрону (A), энергия ионизации (I), химический потенциал (μ), химическая жесткость (η), химическая мягкость (S) и индекс электроотрицательности по Малликену (χ).

На основании значений энергетического зазора можно заключить о стабильности комплексов переходных металлов с ПВП. При сравнении комплексов можно сделать вывод о том, что комплексы меди с ПВП будут более стабильными. Однако, на основании величин Малликеновых зарядов между никелем и кислородом одного из мономерных фрагментов можно предположить, что в случае никеля взаимодействие несколько сильнее. Также на основании малликеновых зарядов можно предположить, что у никелевого комплекса дипольный момент будет больше, что и подтверждают расчеты: дипольный момент у никелевого комплекса равен 0.5, а комплекса с медью – 0.3.

Источники и литература

1) Ghazzy A., Naik R.R., Shakya A. K. Metal–Polymer Nanocomposites: A Promising Approach to Antibacterial Materials// Polymers. 2023. Vol. 15(9). P. 2167-2196.

2) Pramanik S., Das P. Chapter 3 - Metal-Based Nanomaterials and Their Polymer Nanocomposites\ ed. N. Karak. Nanomaterials and Polymer Nanocomposites, Elsevier, 2019. P. 91-121.