**Квантово-химический расчет этилацетоацетаталкоксигидроксиалюмоксана, модифицированного хромом**

**Шаухин М.К.1, Кирилин А.Д.1, Щербакова Г.И.2**

Ассистент

1 МИРЭА-Российский технологический университет, Москва, Россия

*2 Государственный научно-исследовательский институт химии и технологии элементоорганических соединений, Москва, Россия*

*E-mail: mkshauchin@mail.ru*

Органоэлементоксаналюмоксаны состоят из широкого набора олигомерных алюмоксановых и элементоксаналюмоксановых фрагментов [1]. Известно [2], что хром может замещать алюминий в Al(acac)3 с образованием Al0.916Cr0.084(acac)3. Это позволяет предположить, что атом хрома может встраиваться в олигомерную алюмоксановую структуру, не нарушая ее пространственной конфигурации, то есть вполне вероятно существование олигомерных молекул C31H49O18Al4Cr [3].

Целью работы является квантово-химическое моделирование структуры C31H49O18Al4Cr и сравнение с известными в литературе данными по длинам связей Al–O и Cr–O у схожих по структуре соединений и визуализация полученной структуры (Рис. 1).

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| а | б |

**Рис. 1.** Предложенная на основании ФХИ [3] (а) и полученная моделированием (б) структура олигомерного фрагмента хромсодержащего этилацетоацетатэтоксигидроксиалюмоксана.

Квантово-химическое моделирование структуры проводили в базисе 3-21G в программном комплексе HyperChem. Проведено сравнение рассчитанных длин связей с известными в литературе структурами [4, 5]. Получены следующие результаты:

• длины связей Al–O лежат в диапазоне значений от 1.6 до 1.9 Ǻ

• длины связей Cr–O лежат в диапазоне значений от 1.8 до 1.9 Ǻ, не наблюдается значимых отклонений в обеих структурах;

**Литература**

1. Shcherbakova G. I., et all Metallocarbosilanes and elementoxanealuminoxanes as precursors of components of nanostructured ceramic composites // Russ. Chem. Bull. 2020. Vol. 69. P. 875-884.

2. Fahlman B. D., et all Molecular structure of Al0.916Cr0.084(acac)3 // J. Chem. Crystallogr. 2000. Vol. 30. P. 65-67.

3. Щербакова Г. И., и другие Особенности молекулярной структуры органохромоксан-иттрийоксаналюмоксановых олигомеров // Изв. АН, сер. хим. 2021. № 7. С. 1275-1280.

4. Morosin В. The crystal structure of tris­acetylacetonatochromium(III) // Acta Crystallogr. 1965. Vol. 19. P. 131-137.

5. Alyea E. C., et all Covalent compounds of quadrivalent transition metals. Part II. Chromium (IV) tertiary alkoxides and triethylsilyloxide // J. of the Chem. Soc. A. 1971. № 0. P. 772-776.