

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА  
*хімічний факультет*

НАУКОВЕ ТОВАРИСТВО ШЕВЧЕНКА  
*хімічна комісія*



ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

XVII НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ  
«ЛЬВІВСЬКІ ХІМІЧНІ ЧИТАННЯ – 2019»

присвячена 150 річчю від дня створення

**періодичної системи  
хімічних елементів**

2-5 червня 2019 року

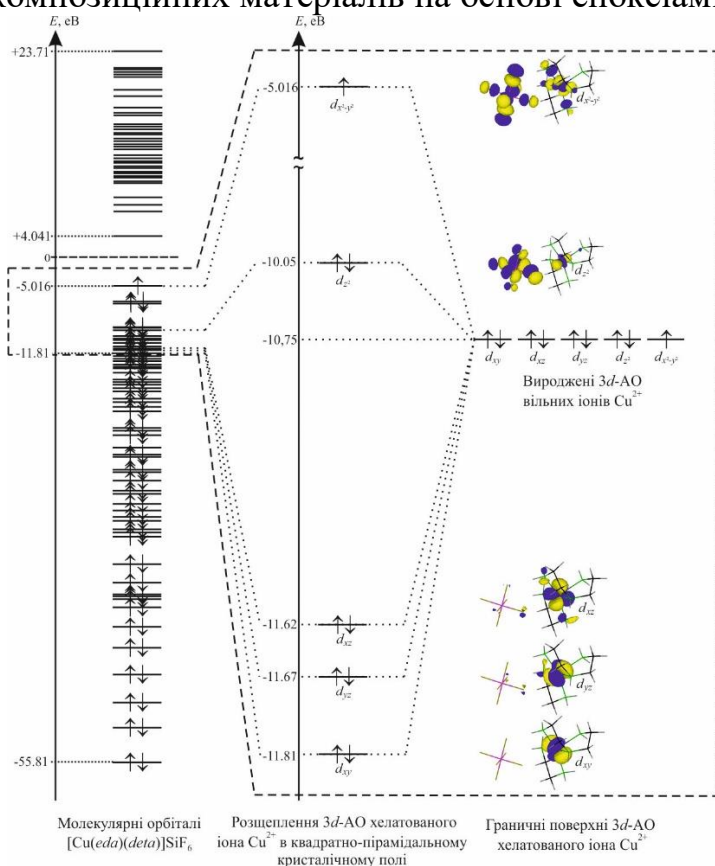
ЛЬВІВ – 2019

# ЕЛЕКТРОННО-СТЕРЕОХІМІЧНІ ПЕРЕДУМОВИ ХЕЛАТУВАННЯ КУПРУМ(ІІ) ГЕКСАФЛУОРСИЛКАТУ АМІННИМИ ЗАТВЕРДНИКАМИ ЕПОКСИДНИХ СМОЛ

**Олена Лавренюк, Борис Михалічко**

Кафедра фізики та хімії горіння,  
Львівський державний університет безпеки життєдіяльності,  
olaw@ukr.net; mykhalitchko@email.ua

Взаємодія солей перехідних металів, зокрема солей міді(ІІ) з поліамінами має винятковий науковий інтерес, оскільки  $\text{Cu(II)} \leftarrow \text{N}$  зв'язування разом зі здатністю поліамінів хелатувати атом металу розглядається як один з найважливіших факторів, що впливає на зниження горючості амінів. Практичне значення процесу утворення хелатних комплексів зумовлене, насамперед, можливістю використовувати неорганічні солі купруму як реакційні антипірени, здатні ефективно пригнічувати горіння композиційних матеріалів на основі епоксіамінних полімерів.



Новий хелатний комплекс  $[\text{Cu}(\text{eda})(\text{deta})]\text{SiF}_6$  (**1**) (*eda* – етилендіамін; *deta* – діетилентріамін) отримували прямою взаємодією дегідратованого  $\text{CuSiF}_6$  з поліетиленполіаміном (*pepa* –  $\text{H}_2\text{N}[-\text{C}_2\text{H}_4\text{NH}-]_n\text{H}$ , де  $n = 1$  (*eda*) і 2 (*deta*)). Кристалічна структура **1** формується з дискретних аніонів  $\text{SiF}_6^{2-}$  і катіонів  $[\text{Cu}(\text{eda})(\text{deta})]^{2+}$ ,  $\text{Cu(II)}$  в яких хелатований *eda* і *deta*. Координаційний багатогранник іона  $\text{Cu}^{2+}$  – це деформована квадратна піраміда, вершини якої посідають  $-\text{NH}-$  і  $-\text{NH}_2$  групи *eda* і *deta*.

Виконані DFT обчислення (обмежений метод Хартрі-Фока з базисним набором орбіталей 6-31G\* V3LYP рівня з використанням програмного забезпечення NucleChem, версії 8.0.6) процесу хелатування засвідчили, що в координаційному вузлі **1** під впливом квадратно-пірамідального кристалічного поля відбувається суттєвий перерозподіл електронної густини, через що виродження  $3d$  атомних орбіталей іона  $\text{Cu}^{2+}$  знімається, а  $3d$  орбіталі розщеплюються на п'ять енергетичних рівнів –  $d_{xy} < d_{yz} < d_{xz} < d_{z^2} \ll d_{x^2-y^2}$  (Рисунок).