

ИССЛЕДОВАНИЯ РЕАКЦИЙ ПОЛУЧЕНИЯ СОЕДИНЕНИЙ КАРБОДИИМИДНОЙ СТРУКТУРЫ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ

О.А. Литова, А.В. Гаврилова, А.Д. Кирилин, С.П. Князев, Е.Г. Гордеев

*Московская государственная академия тонкой химической
технологии им.М.В. Ломоносова*

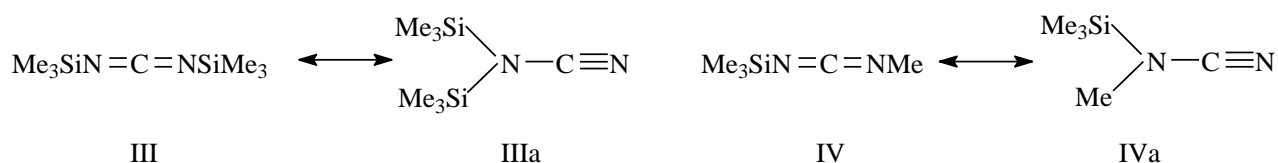
Новые предкерамические мономеры и олигомеры незаменимы для получения уникальных термостойких композиционных и керамических материалов с высокими прочностными характеристиками, работающих в условиях высоких циклических термомеханических нагрузок при агрессивном воздействии внешней среды. Целью настоящей работы является исследование реакций получения соединений карбодиимидной структуры с помощью методов компьютерной химии.

В качестве исследуемых реакций были выбраны реакции взаимодействия N,N'-бис(триметилсилил)карбодиимида с диметилдихлорсиланом и диметоксидиметилсиланом, а также реакция взаимодействия гексаметилдисилазана с дицианамидом

Известно, что углеродные аналоги N,N-дисилилпроизводных цианамидов в обычных условиях могут существовать в двух изомерных формах: цианамидной $(R_3Si)_2N-C\equiv N$ и карбодиимидной $(R_3SiN=C=NSiR_3)$.

Для N-силил-N-алкил(ацил)карбодиимидов не исключена возможность существования таутомерного равновесия.

С целью проверки данного предположения и с целью определения возможного строения молекул, было проведено моделирование и расчет молекулярной и электронной структур цианамидной и карбодиимидной форм.



На следующем этапе с целью установления структуры конечного продукта реакций взаимодействия N,N'-бис(триметилсилил)карбодиимида с диметилдихлорсиланом и диметоксидиметилсиланом эти реакции были исследованы с помощью методов компьютерной химии.