

Квантово-химическое моделирование процесса синтеза сульфидов железа и цинка из их хлоридов

© Бараева¹⁺ Линара Рифатовна, Сабахова² Гузеля Игоревна
и Ахметова^{1,3*} Резида Тимерхановна

¹ Кафедра технологии неорганических веществ и материалов. Институт нефти, химии и нанотехнологий. Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 238-56-94. E-mail: office@kstu.ru, baraeva.linara@yandex.ru

² Отдел увеличения нефтеотдачи пластов. Татарский научно-исследовательский и проектный институт нефти ОАО «Татнефть». Ул. М. Джалиля, 32. г. Бугульма, 423230. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (855) 947-85-55. E-mail: sabahova.guzel@yandex.ru

³ Кафедра химии и инженерной экологии в строительстве. Институт строительных технологий и инженерно-экологических систем. Казанский государственный архитектурно-строительный университет. Ул. Зеленая, 1, корпус 1. г. Казань, 420043. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 510-47-42. E-mail: info@ksaba.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сульфид железа, сульфид цинка, кислоты Льюиса, квантово-химическая программа Priroda 6.

Аннотация

Квантово-химические расчеты выполнены с использованием программы Priroda 6 посредством гибридного метода функционала плотности dft functional=PBE с базисом basis 4.in. Высокая температура синтеза сульфидов является условием протекания химических взаимодействий между компонентами, поскольку устойчивые циклические серные молекулы переходят в радикалы. Однако известен и другой путь радикальных превращений серы и связан он с активацией серы под действием электрофильных компонентов. Расчетами доказано, что в процессе синтеза сульфидов железа и цинка из их хлоридов и серы образуются сложные сульфидные комплексы, содержащие S_n ($n = 1, 2, 4, 6, 8$). Установлено активирующее действие хлоридов на серу, заключающееся в дестабилизации и раскрытии циклических молекул.