

## **О начальной стадии радикально-координационной полимеризации некоторых мономеров в присутствии ферроцена**

© Смирнов<sup>1+</sup> Александр Вадимович, Валиахметов<sup>2</sup> Эмиль Альфредович,  
Диниахметова<sup>1</sup> Диана Радиковна, Колесов<sup>1\*</sup> Сергей Викторович

<sup>1</sup> Лаборатория полимерной химии. Уфимский Институт химии, УФИЦ РАН. пр-т. Октября,  
71. г. Уфа, 450054. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 272-85-22.

E-mail: SmirnovAV053@yandex.ru

<sup>2</sup> Кафедра высокомолекулярных соединений и общей химической технологии. Уфимский  
университет науки и технологий. ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан.  
Россия. Тел.: +7 (347) 229-97-24. E-mail: vali.ea@mail.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** радикально-координационная полимеризация, радикал роста, иницирующий радикал, DFT метод, ферроцен, стирол, метилметакрилат, винилхлорид, аллилхлорид.

### **Аннотация**

Металлоцены на данный момент нашли свое применение в различных сферах науки. В частности, активно ведутся исследования по их применению в процессах полимеризации виниловых мономеров, металлоцены включают в состав иницирующих и каталитических систем. Именно на примере металлоценов была показана возможность формирования в ходе радикально-иницируемой полимеризации виниловых мономеров координационных активных центров, на которых рост цепи осуществляется уже не по радикальному, а по координационному механизму. Одним из наиболее важных и практически доступных металлоценов является ферроцен, применение которого в процессах радикальной полимеризации также активно исследуется. Однако в литературе отсутствует подробная информация о радикальных превращениях, происходящих с ферроценом на начальных стадиях радикальной полимеризации, в частности не известен порядок реагирования радикалов с ферроценом, а также влияние природы радикала на структурные и спиновые характеристики продуктов, которые являются интермедиатами в образовании координационных активных центров. Поэтому целью данной работы являлось исследование реакций, происходящих в начальной стадии радикально-координационной полимеризации в присутствии ферроцена. Определена очередность взаимодействия радикалов роста и иницирующего радикала с циклопентадиенильным кольцом ферроцена. Показано, что взаимодействие иницирующего радикала с ферроценом маловероятно по сравнению с мономерами. В случае начальной стадии радикальной полимеризации винилхлорида и аллилхлорида с ферроценом в первую очередь реагируют радикалы роста, а не иницирующий. В случае же стирола и метилметакрилата наблюдалась конкурентная ситуация. Также было показано, что природа радикалов роста, а именно вид заместителя при углеродном атоме, связанном с циклопентадиенильным кольцом ферроцена, не оказывает влияния на распределение спиновой плотности в аддуктах ферроцена с радикалами роста. Данный вывод представляется важным в виду того, что последующей реакцией в механизме формирования координационных активных центров в ходе радикально-координационной полимеризации является рекомбинация металлоцентрированного радикала с радикалом роста.

### **Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:**

Смирнов А.В., Валиахметов Э.А., Диниахметова Д.Р., Колесов С.В. О начальной стадии радикально-координационной полимеризации некоторых мономеров в присутствии ферроцена. *Бутлеровские сообщения*. 2023. Т.74. №5. С.24-31. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-74-5-24

### **Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:**

Смирнов А.В., Валиахметов Э.А., Диниахметова Д.Р., Колесов С.В. О начальной стадии радикально-координационной полимеризации некоторых мономеров в присутствии ферроцена. *Бутлеровские сообщения А*. 2023. Vol.5. No.2. Id.10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RA/23-5-2-10