

## **Определение геометрии молекулы метилсилана методом магнитного резонанса**

Данная работа посвящена изучению строения молекулы метилсилана ( $\text{CH}_3\text{Si}$ ). Интерес к этой молекуле вызван тем, что в ней присутствует кремний, который является основным материалом в микроэлектронике.

Он обладает рядом уникальных свойств: термостабильностью, прочностью на разрыв и сжатие и другими. Уверенно можно сказать, что вся вычислительная техника и микроэлектроника, будут еще долго базироваться на кремнии, и поэтому необходимо знать больше о свойствах соединения кремния с другими элементами.

Задачу определения геометрии молекулы, как нам представляется, можно решать методом моментов в ЯМР.

Ядерный магнитный резонанс – это резонансное поглощение энергии высокочастотного электромагнитного поля веществом, содержащим ядра с ненулевым спином, помещенным во внешнее магнитное поле. Вторым моментом спектра ЯМР называют среднее значение квадрата поля по спектру:

$$S_2 = \int (H - H_0)^2 f(H) dH,$$

где  $f(H)$  – кривая поглощения энергии.

Геометрию молекулы можно определить из сопоставления экспериментального значения второго момента спектра ЯМР с его теоретическим значением, найденным по формуле Ван Флека: [2]

$$S_2 = \frac{1}{N} \sum \left( \frac{3}{5} I(I+1) g_n^2 \beta_N^2 \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}^6} + \frac{4}{15} I_f(I_f+1) g_f^2 \beta_N^2 \sum_f \frac{1}{r_{ij}^6} \right)$$

где  $i, j$  нумеруют атомы водорода, а  $f$  нумерует атом кремния. Остальные обозначения общепринятые.

Как видно из формулы, для вычисления второго момента необходимо знать всевозможные расстояния между магнитными ядрами молекул. Следовательно, задавая произвольно разные геометрии молекулы можно каждый раз вычислять второй момент, пока не получится экспериментальное его значение. В данной работе мы меняем параметры C – H (1.07-1.2)Å, H – Si (0.9-1.3)Å Si – C (0.5-0.9)Å. Основанием для этого является общепринятые значения этих величин в разных соединениях: C – H (1.09Å), H – Si (1.1Å), Si – C (1.7Å).[4]

Некоторые значения второго момента метилсилана, вычисленные по формуле Ван Флека, приводятся в таблице 1.

Сравнение приведенных здесь значений  $S_2$  с экспериментальными его значениями могли бы дать определенную информацию о реальной геометрии молекулы метилсилана.

**Табл.1**

C-H(Å)	Si-C(Å)	H-Si(Å)	$S_2$ (Гц <sup>2</sup> )
1.07	0.5	0.9	9.62
1.08	0.6	1.0	5.11
1.09	1.1	1.1	2.88
1.1	0.8	1.2	1.71
1.2	0.9	1.3	1.06
1.09	0.9	0.9	9.62
1.1	0.6	1.2	1.71
1.08	0.8	1.0	5.12
1.2	0.5	1.1	2.88

### Литература

1. Лундин А. Г., Федин Э. И., *Ядерный магнитный резонанс. Основы и применения.* Наука, Новосибирск, 1980.
2. Сергеев Н. А., Рябушкин Д. С. *Основы квантовой теории ядерного магнитного резонанса.* - Логос, 2013.
3. Сликтер Ч., *Основы теории магнитного резонанса.* М., 1967.
4. Бауков Ю.И. Информационные ресурсы: статья Соросовского Образовательного журнала. Соединения кремния в необычных координационных состояниях [Электронный ресурс] / Ю.И. Бауков – Режим доступ: <http://www.pereplet.ru/obrazovanie/stsoros/1167.html>