

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.
Регистрационный код публикации: 9-17-5-44 Подраздел: Физическая органическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 547.173+539.194. Поступила в редакцию 24 ноября 2009 г.

Изучение строения и внутримолекулярной изомеризации β -дикетонатных комплексов металлов

© Стариков Андрей Георгиевич,^{1*} Миняев Руслан Михайлович,²
Коваль Виталий Викторович² и Старикова Алена Андреевна³

¹ Южный научный центр РАН. Пр. Стачки, 194/2, г. Ростов-на-Дону, 344090. Россия.

Тел. (863) 243-44-88. E-mail: andr@ipoc.rsu.ru

² НИИ физической и органической химии Южного федерального университета.

Пр. Стачки, 194/2. г. Ростов-на-Дону, 344090. Россия.

³ Химический факультет Южного федерального университета.

Ул. Зорге, 7. г. Ростов-на-Дону, 344090, Россия.

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: β -дикетоны, комплексы, метод теории функционала плотности, изомеризация.

Аннотация

Методом теории функционала плотности (B3LYP/6-311++G(d,p)) проведено квантовохимическое исследование строения и внутримолекулярных перегруппировок бис-хелатных комплексов Be(II), Cr(II), Mn(II), Fe(II), Co(II), Cu(II) и Zn(II) с малоновым альдегидом. Показано, что комплексы хрома и меди имеют планарное строение, а у остальных – тетраэдрическая стереохимия координационного узла. Наиболее предпочтительным механизмом внутримолекулярной изомеризации рассмотренных β -дикетонатов металлов является диагональный твист, диссоциативный путь реализуется только в комплексах бериллия.