

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 10-19-1-12

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>
УДК 542.8:544.14. Поступила в редакцию 22 марта 2010 г.

Тематический раздел: Квантовая химия.

Подраздел: Элементоорганическая химия.

Квантово-химические методы исследования геометрического строения гидридных комплексов палладия(II) со стиролом

© Звягинцев Николай Васильевич⁺ и Кондратьев Лев Тимофеевич*

Кафедра химии и общей экологии. Российский государственный университет туризма и сервиса. Ул. Главная, 99. пос. Черкизово, 141221. Московская область. Россия.

Тел.: (495) 940-83-60. E-mail: info@rguts.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: комплексы палладия(II), гидрокарбонилирование стирола, квантово-химические расчеты, молекулярная структура.

Аннотация

В работе рассматривается геометрическое строение комплексов палладия(II), через образование которых протекает реакция карбонилирования стирола. Исследовано геометрическое строение гидридного комплекса палладия со стиролом, хлорид-анионом и оксидом углерода(II), а также гидридного комплекса палладия со стиролом, хлорид-анионом и ацетат-анионом. Расчеты произведены методом V3LYP с использованием комбинированных базисных наборов, в которых для атома палладия применялись базисы TZVP и DZVP, для остальных атомов применялись различные валентно-расщепленные базисы. По результатам расчетов сделаны выводы по влиянию геометрической структуры комплексов на конечный выход продуктов реакции карбонилирования стирола.