

Квантово-химическое моделирование образования никелевых интермедиатов в условиях каталитического циклоприсоединения этилакрилата с норборнадиеном

© Шамсиев Равшан Сабитович,^{*+} Дмитриев Дмитрий Викторович
и Флид Виталий Рафаилович

Кафедра физической химии. Московский институт тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова (Государственный технологический университет). пр. Вернадского, 86. г. Москва, 119571. Россия. Тел.: (495) 936-89-13. E-mail: Shamsiev.R@gmail.com

^{*}Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: комплексы никеля, норборнадиен, циклоприсоединение, неэмпирические квантово-химические расчеты, метод функционала плотности.

Аннотация

Методом функционала плотности (PBE) в базисе TZ2P детально исследовано взаимодействие бис(η^4 -норборнадиен)никеля (катализатора реакции циклоприсоединения) с этилакрилатом и норборнадиеном. Рассмотрено формирование и взаимопревращение двух-, трех- и четырехлигандных комплексов никеля (0) различного состава, а также их изомеров. Показано, что молекула растворителя (толуола) не может конкурировать с олефинами за координационное место. Образование аддуктов с числом лигандов более 3 невыгодно по кинетическим и термодинамическим причинам. На основе анализа энергетических (ΔH_0 , ΔH^\ddagger) параметров определены наиболее вероятные интермедиаты реакции циклоприсоединения.