

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ 1,3,5-ТРИАРИЛ-1,3,5-ТРИАЗАЦИКЛОГЕКСАНТРИКАРБОНИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛОВ ПОДГРУППЫ ХРОМА

Галимуллин Р.Н., * Андреева М.А., Колпакова Е.В., Курамшин А.И., Галкин В.И.

Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, 420008 Россия
E-mail: ramis-fenix@mail.ru

Для оптимизации существующих и разработки новых каталитических процессов необходимо изучение строения активных интермедиатов каталитической реакции и факторов, управляющих их образованием. Поэтому было решено провести теоретическое и экспериментальное исследование взаимодействия диалкилфосфитов с η^3 -(1,3,5-триорганил-1,3,5-триазациклогексан)трикарбонильными производными металлов группы хрома.

Таблица 1. Рассчитанные методом B3LYP/LANL2Z свободные энергии Гиббса для реакций η^3 -[(1,3,5-трифенил)-1,3,5-триазациклогексан]трикарбонилметаллов(0) группы хрома с диэтилфосфитом.

Металл	$\Delta G_{\text{реакции}}$, кДж/моль		
	Cr	Mo	W
Реакция (1)	-23.9	-28.0	-22.8
Реакция (2)	-0.3	-4.1	+2.3
Реакция (3)	-10.8	-14.8	-11.7
Реакция (4)	+29.8	+19.2	+22.1
Реакция (5)	+19.8	+14.3	+18.2
Реакция (6)	-41.0	-34.0	-22.8
Реакция (7)	-16.3	-5.7	-2.4
Реакция (8)	-28.1	-14.8	-14.6
Реакция (9)	+8.6	+4.4	+13.5

В соответствии с данными квантовохимических расчетов, наиболее выгодным маршрутом взаимодействия диэтилфосфита и триазинантрикарбонильного комплекса металла группы хрома является реакция, в результате которой с атомом переходного металла за счет неподеленных пар фосфора связываются две ионизированные молекулы, и происходит гаптотропная перегруппировка $\eta^3 \rightarrow \eta^1$ координированного 1,3,5-трифенил-1,3,5-триазациклогексана. Свободная энергия этого процесса составляет -34.0 кДж/моль. Рассчитанные теоретические данные были подтверждены экспериментально

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-33-00445