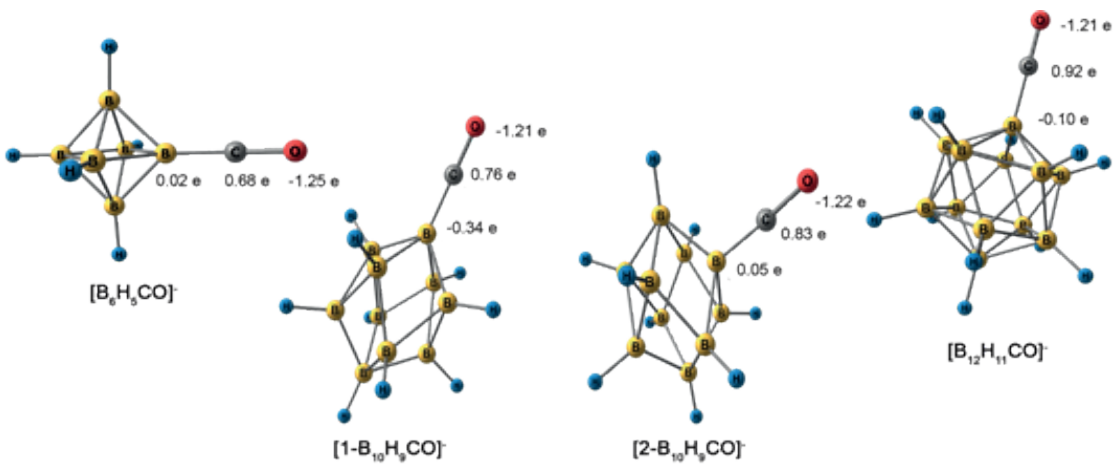
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ КЛОЗО-БОРАТНЫХ АНИОНОВ С ЭКЗО-ПОЛИЭДРИЧЕСКИМИ КАРБОНИЛЬНЫМИ ГРУППАМИ

Клюкина И.Н.,[б]* Новиков А.С.,[в]
Жданов А.П.,[б] Жижин К.Ю.,[б] Кузнецов Н.Т.[б]

*[а] Санкт-Петербургский Государственный Технологический Институт
Московский проспект 26, 190013, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: klukinil@gmail.com*
*[б] Институт Общей и Неорганической Химии им. Н.С. Курнакова РАН
Ленинский проспект 31, 117907, Москва, Россия*
*[в] Санкт-Петербургский Государственный Университет, Институт Химии, Университетская наб. 7-9,
199034, Санкт-Петербург, Россия*

Данная работа посвящена анализу структурных особенностей, и реакционной способности карбонильных производных клозо-декаборатного аниона общего вида $[B_nH_{n-1}CO]^-$ (n = 6, 10, 12) и $[B_nH_{n-1}COR]^-$ (n = 6, 10, 12, R=OH, OCH_3, NH_2, H, CH_3). Расчеты проведены на уровне теории ωB97X-D3/6-31++G(d,p). The B–B, B–H, B–C and C–O взаимодействия были изучены с использованием квантово-топологического анализа электронной плотности (Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM)). Основные топологические параметры электронной плотности были рассчитаны. Было найдено хорошее соответствие между результатами анализа кратности связей по Вибергу и QTAIM-анализом B-C и C-O взаимодействий. Основные дескрипторы химической реакционной способности были также вычислены. Электорфильные центры молекул были найдены на основе индексов Фукуи, с использованием NBO и AIM атомных зарядов.



Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 18-73-00049).