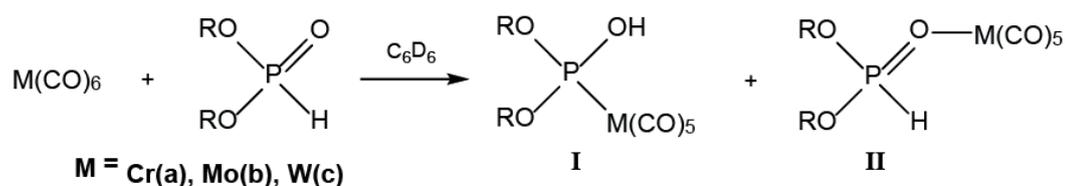


ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИСЛОТНОСТИ
ДИАЛКИЛФОСФИТОВ, КООРДИНИРОВАННЫХ С АТОМОМ ХРОМА

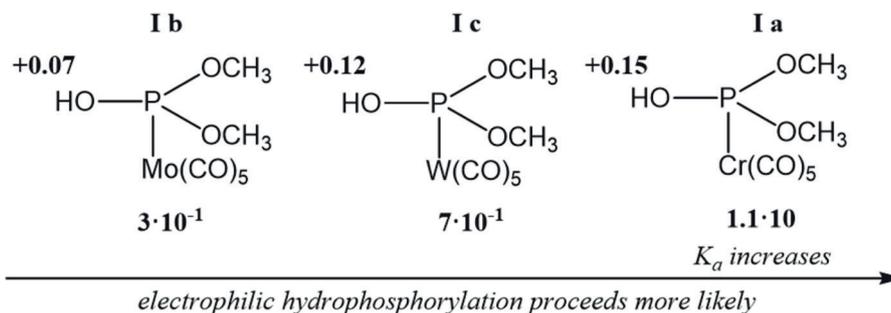
Плотникова А.В., Колпакова Е.В., Курамшин А.И.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
420008, Казань, ул. Кремлевская, 18
e-mail: anezka_93@mail.ru

Нами было обнаружено, что взаимодействие диметилфосфита с гексакарбонилметаллами группы хрома приводит к образованию комплексов, содержащих в координационной сфере проявляющую значительную кислотность гидрокситаутомерную форму фосфита¹.



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 исследование взаимодействия диалкилфосфитов с гексакарбонилметаллами группы хрома. Мы оценили эффективный положительный заряд атома водорода P-OH в соединениях I с помощью квантовохимического моделирования методом функционала плотности (B3LYP/LANL2DZ). Также мы провели квантовохимическое определение статической и динамической кислотности модельных соединений с хромом.



Литература

1. Плотникова А.В., Курамшин А.И., Колпакова Е.В., Галкин В.И., Журнал общей химии, 2018, 88(9), 1538-1543.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-33-00445.