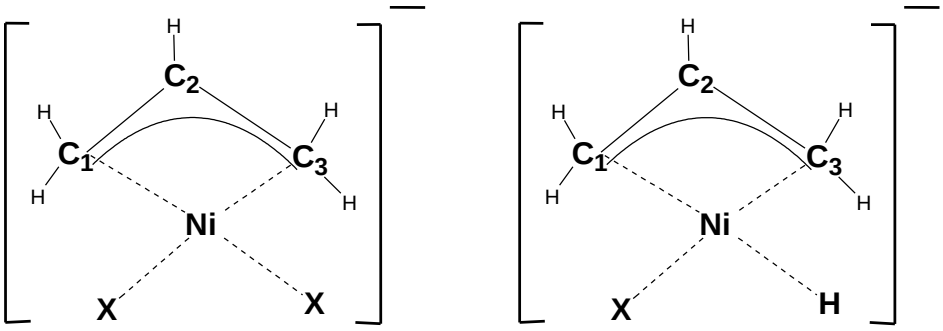
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМНОГО ВЛИЯНИЯ ЛИГАНДОВ В СТРУКТУРЕ η^3-АЛЛИЛЬНЫХ ГАЛОГЕНОГИДРИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ

О. Ю. Ткаченко, С. А. Рогов

Московская государственная академия тонкой химической технологии (МИТХТ) им. М.В. Ломоносова

η^3–Аллильные комплексы никеля играют важную роль в управляемом каталитическом синтезе различных органических соединений. Для оценки реакционной способности этих комплексов необходимо знать как состав координационной сферы влияет на их структурные и зарядовые характеристики.

Методом функционала плотности (DFT) с вычислением обменно-корреляционной энергии в приближении PBE [1] в базисе с псевдопотенциалом SBK [2] при помощи программы "Priroda" [3] проведены расчеты двух серий анионных η^3–аллильных комплексов никеля: дигалогенидных $[\eta^3\text{–}C_3H_5NiX_2]^-$ и галогеногидридных $[\eta^3\text{-}C_3H_5NiHX]^-$, где X = F, Cl, Br, I.



Установлено, что:

В обеих сериях комплексов природа галогена X наиболее существенно влияет на расстояния металл-углерод Ni-C.

Степень ионности связи Ni-X линейно возрастает с увеличением электроотрицательности галогенид-иона.

Некоторые структурные и зарядовые характеристики линейно коррелируют с электроотрицательностью галогенид-иона.

С увеличением электроотрицательности галогенид-иона в ряду I-Br-Cl-F усиливается взаимное влияние галогенид- и гидрид-ионов, проявляющееся в возрастании разности длин связей $Ni\text{-}C_1$ и $Ni\text{-}C_3$.

1. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. *Phys. Rev. Lett,*. **1996**, V.77. P.3865.
2. Stevens W.J., Basch H., Krauss M. *J.Chem. Phy,*. **1984**, V.81 P.6026.
3. Laikov D.N. *Chem. Phys. Lett.* **1997**, V.281. P.151.