

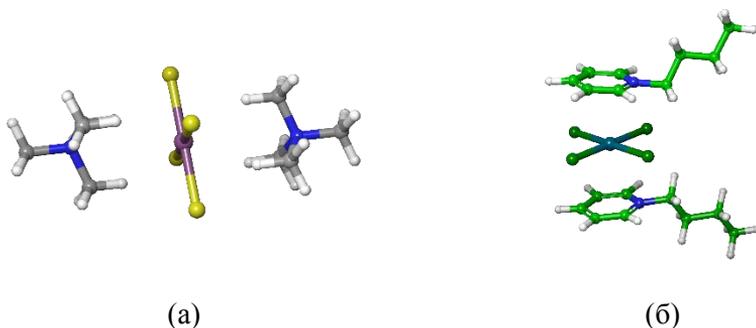
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ СТРОЕНИЯ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ С ТЕТРАХЛОРОПАЛЛАДАТ-АНИОНОМ

Юлмасов Г.С.

Тверской государственный университет
170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33

Металлсодержащие ионные жидкости (ИЖ) известны уже несколько десятилетий, и область их применения постоянно расширяется. Атом металла может входить в состав как катиона, так и аниона, и влиять на такие свойства ионных жидкостей, как магнетизм, люминесценцию, окислительно-восстановительную активность. Придание этих свойств ионным жидкостям приводит к получению многофункциональных материалов. Среди всех известных металлсодержащих ионных жидкостей наибольший интерес представляют комплексные соли палладия и платины, которые широко используются в органическом синтезе в качестве катализаторов.

В данной работе проведено теоретическое изучение геометрии ряда молекул аммониевых и пиридиниевых ионных жидкостей с анионом тетрахлорпалладата. Были выполнены квантово-химические расчеты в программе Jaguar с помощью метода теории функционала плотности. При расчете использовался функционал M06-2X в комбинации с базисом LACVP**+. Ниже представлены примеры полученных структур (см. рисунок).



Структуры тетрахлорпалладата тетраметиламмония (а)
и тетрахлорпалладата цис-бутилпиридиния (б)

Рассчитаны энергии связывания в рассмотренных молекулах, что позволило оценить соотношение цис-транс изомеров в случаях, когда такая изомерия возможна. Полученная геометрия позволила оценить наличие водородных связей между протонами катиона и атомами Cl в тетрахлорпалладат-анионе. Установлено, что аммониевые ионные жидкости образуют значительно большее количество связей, чем пиридиниевые. Стоит отметить, что наличие в катионе функциональной группы -ОН приводит к более прочной водородной связи между её протоном и атомами хлора в анионе за счет большей кислотности связи O-H по сравнению с C-H связями.