

# DFT исследование строения комплексов ферроцена со стиролом и полистирольным радикалом<sup>1</sup>

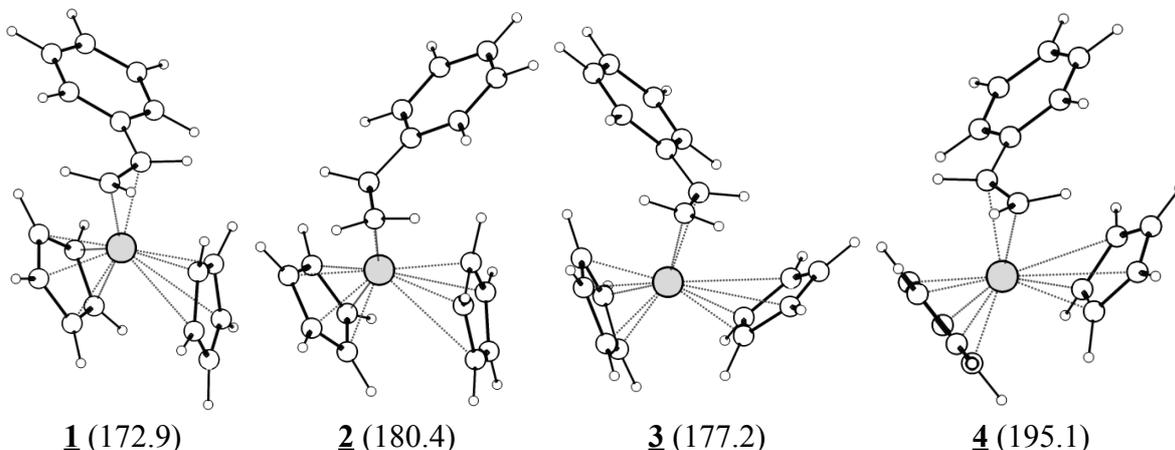
**Фризен А.К., Хурсан С.Л.**

аспирантка

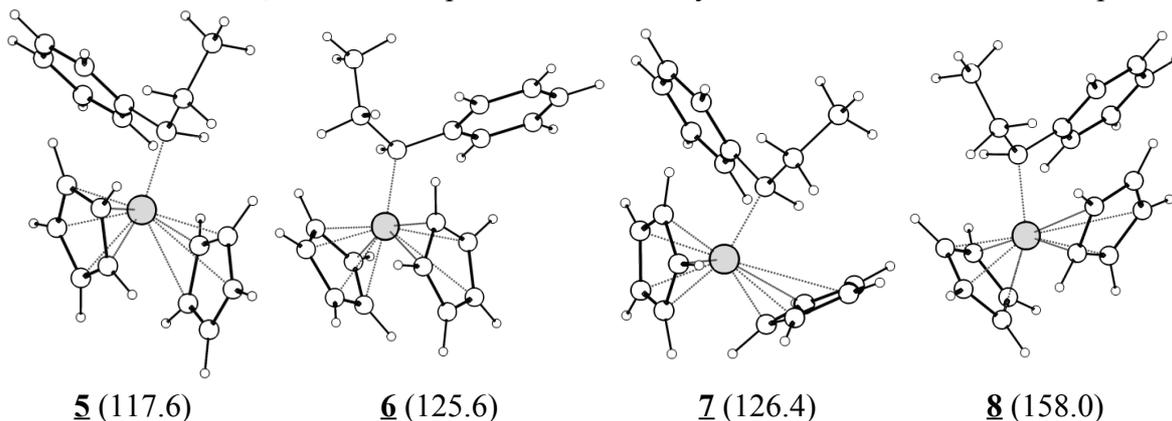
Институт органической химии УНЦ РАН, Уфа, Россия

FrizenAK@rambler.ru

Для более глубокого понимания процессов, имеющих место при комплексо-радикальной полимеризации стирола в присутствии ферроцена ( $\text{Cp}_2\text{Fe}$ ) было проведено квантово-химическое изучение комплексообразования  $\text{Cp}_2\text{Fe}$  со стиролом, а также с полистирольным радикалом  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}\dot{\text{C}}\text{HPh}$ . Расчеты проводили в программе PC GAMESS 7.0 методом (R/RO)B3LYP/6-31G(d,p). Найдено, что  $\text{Cp}_2\text{Fe}$  образует со стиролом 4 типа комплексов (структуры **1–4**, приведённые ниже; в скобках указаны рассчитанные величины изменения энергии при комплексообразовании –  $\Delta E_{\text{компл}}$ ), различающихся между собой способом ориентации цикlopентадиенильных колец по атому Fe («верхними» или «нижними» углеродными атомами), а также положением фенильной группы относительно Cp-колец (над «искажённым» или «неискажённым» кольцом):



Отметим, что в связи со значительной эндотермичностью перечисленные структуры должны образовываться в полимеризационной системе в весьма малых количествах. С радикалом роста  $\text{Cp}_2\text{Fe}$  также образует 4 типа комплексов (структуры **5–8**), которые, судя по величинам  $\Delta E_{\text{компл}}$ , несколько прочнее соответствующих комплексов с мономером:



Неспаренный электрон в комплексах **5–8** локализован на атоме железа, что говорит о том, что данные структуры могут являться «живущими» активными центрами, признаки которых обнаруживаются в экспериментах.

<sup>1</sup>Тезисы доклада основаны на материалах исследований, выполненных при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта № 05-03-32087А) и фонда поддержки научных школ (грант НШ 9342.2006.3.).