

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ФОСФАНИЛАЛАНА

*Лисовенко А.С.,<sup>1</sup> Тимошкин А.Ю.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>*Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9*

*e-mail: lisovenkoanna@gmail.com*

Соединения элементов 13–15 групп интересны в связи с потенциальным использованием в качестве молекулярных прекурсоров для синтеза тонких пленок полупроводников. Соединения общей формулы  $(R_2EMR'_2)_n$  (E – элемент 15 группы, M – элемент 13 группы, R и R' – водород или органические заместители) обычно являются олигомерами или полимерами. Стабилизация мономерной формы возможна при наличии объёмных заместителей R и R'. В настоящей работе использован другой подход: донорно-акцепторная (ДА) стабилизация мономерных водородных соединений  $H_2EMH_2$  путем комплексообразования с основаниями Льюиса.

В докладе будут представлены результаты квантово-химических расчетов ДА комплексов  $AlH_3$ ,  $AlH_2I$  и  $AlH_2PH_2$  с различными донорными молекулами (Ru, DMAP, NMe<sub>3</sub>, PMe<sub>3</sub>, N-содержащие циклические и ациклические карбены). В работе будут сопоставлены различные критерии донорной способности карбенов (структурный, энергия ВЗМО, энергия перехода синглет-триплет, сродство к протону). Рассчитаны термодинамические характеристики ДА комплексов, энергии перестройки донорных и акцепторных фрагментов при комплексообразовании, энергии ДА связей и величины переноса заряда.

В результате работы выявлены карбены, обладающие наибольшей донорной силой, комплексообразование с которыми приводит к наиболее устойчивым ДА комплексам. Среди N-содержащих циклических карбенов такими являются циклоалкиламинокарбены (СААС), включающие только один атом азота в  $\alpha$ -положении к карбеновому углероду.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта СПбГУ-DFG 12.65.44.2017 «Донорно стабилизированные мономерные пниктидоаланы и галланы».