

DOI: 10.15643/vnrm-2023-64

## ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ЦИРКОНОЦЕНОВ В РЕАКЦИИ ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ АЛКЕНОВ И СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛГИДРИДНЫХ ИНТЕРМЕДИАТОВ

**Бикмеева А.Х., Ковязин П.В., Палатов Э.Р., Парфенова Л.В.**

<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,  
лаборатория структурной химии, Уфа, Россия  
e-mail: [almira.bikmееva@gmail.com](mailto:almira.bikmееva@gmail.com)

В работе изучена активность, хемо- и стереоселективность каталитических систем  $L_2ZrCl_2$ - $HAIBu^i_2$ -активатор (ММАО-12 или  $[Ph_3C][B(C_6F_5)_4]$ ) в реакции димеризации и олигомеризации гексена-1 (схема 1) [1].

Показано, что комплексы Zr со стерически ненагруженными лигандами (**1a**, **1c-e**) катализируют образование винилиденевого димера гексена-1 (**3**) с выходами 78-98%. В реакции, катализируемой цирконоценонами с объемными циклопентадиенильными (**1b**, **1j**) или электроноакцепторными инденильными (**1f-i**) заместителями, получены олигомеры (**4**).

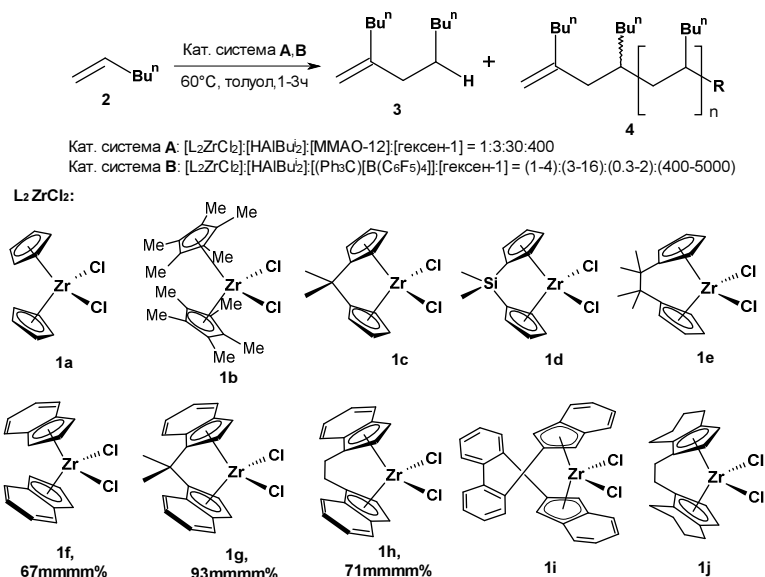


Схема 1. Трансформация гексена-1 под действием систем  $L_2ZrCl_2$ - $HAIBu^i_2$ -активатор.

Наиболее стереоселективными оказались катализаторы, содержащие в своем составе инденильные лиганды (**1f**, **1g**, **1h**). В изучаемых системах стереоселективность существенно зависела от типа используемого активатора, что свидетельствует о значительном влиянии сокатализатора на процесс стереорегулирования в ходе координации алкена каталитически активными центрами.

Методом ЯМР-спектроскопии изучен состав гидридных интермедиатов, образующихся в реакции *ansa*- $Me_2C_2Pr_2ZrCl_2$  (**1c**) и  $Ind_2ZrCl_2$  (**1f**) с  $HAIBu^i_2$  и активаторами. Обнаружен бициркониевый комплекс  $[L_2ZrH_2 \cdot L_2ZrHCl \cdot ClAlR_2]$ , который является предшественником каталитически активных центров, определяющих направление реакции димеризации алкенов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 22-23-00818).

### Литература

1. Parfenova L.V., Kovyazin P.V., Bikmееva A.Kh., Palatov E.R., Ivchenko P.V., Nifant'ev I.E., Khalilov L.M. // *Molecules*. 2023. V.28. P. 2420.