

# Palládium-szalán komplexek flexibilitásának modellezése

## Modeling the flexibility of palladium-salan complexes

BALOGH Álex Kálmán<sup>1</sup>, dr. FEHÉR Péter Pál<sup>2</sup>,  
Prof. dr. JOÓ Ferenc<sup>1</sup>, dr. PURGEL Mihály<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék  
4032 Debrecen, Egyetem tér 1,  
DE Fizikai Kémiai Tanszék, 4002 Debrecen, Pf. 400, +36 52 512 900  
<http://fizkem.unideb.hu>

<sup>2</sup>MTA Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet  
1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.  
Levelezési cím: 1519 Budapest, Pf. 286., +36 1 382 6400

### ABSTRACT

A novel simple topological description of metal-salen-type complexes is presented through the palladium-(sulfo)salan model compound. The selected coordinates with which we define the spatial position of the spine and arms are suitable for systematic conformational analysis, which also makes it possible to find less favorable conformers by quantum chemical methods. Comparison of different compounds and isomers becomes easy using these coordinates.

Palladium-salan complexes are also used in hydrogenation reactions, the catalytically active form of which, the monohydride complex, can be formed in several possible ways. In the first step of the process, the substitution of the phenolate arm and the hydrogen molecule takes place directly or via an aqua-complex intermediate, indirectly. Direct proton transfer from the coordinated hydrogen molecule to the oxygen of the phenolate arm is preferred, which in most cases is the rate-determining step. We also examined the emerging hydrogen bridge types, among which we found characteristic patterns.

**Keywords:** flexibility, mechanism, semi-empirical, DFT, stereoisomerism

### KIVONAT

A palládium-(szulfo)szalán modellvegyületen keresztül mutatjuk be a fém-szalén típusú komplexek egy új és egyszerű topológiai leírását. A kiválasztott koordináták, melyekkel a gerinc és a karok térállását definiáljuk, alkalmasak a szisztematikus konformáció-analízisre, ami a kevésbé kedvező konformerek megtalálását is lehetővé teszi kvantumkémiai módszerrel. A különböző vegyületek és izomerek összehasonlítása egyszerűvé válik ezen koordináták alkalmazásával.

A palládium-szalán komplexeket hidrogénezési reakcióban is alkalmazzák, melyek katalitikusan aktív formája, a monohidrido-komplex több lehetséges úton is kialakulhat. A folyamat első lépésében a fenolát kar és a hidrogénmolekula szubsztitúciója valósul meg direkt, vagy egy akvakomplex intermedieren keresztül, indirekt módon. A koordinált hidrogénmolekuláról a fenolát kar oxigénjére történő közvetlen protontranszfer preferált, ami a legtöbb esetben a sebességmeghatározó lépés. Továbbá megvizsgáltuk a kialakuló hidrogén-híd típusokat, melyek közt jellegzetes mintázatokat találtunk.

**Kulcsszavak:** flexibilitás, mechanizmus, szemiempirikus, DFT, sztereoizoméria