

DFT calculations as a ligand toolbox for the synthesis of active initiators for ROP of cyclic esters.

Autorzy

Dawid Jędrzkiewicz
Danuta Maria Kantorska
Jakub Wojtaszak
Jolanta Ejfler
Sławomir Szafert

Rok wydania

2017

Czasopismo

Dalton Transactions

Numer woluminu

46

Strony

4929-4942

DOI

10.1039/c7dt00394c

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

New heteroleptic zinc dimeric complexes bearing an aminophenolate ligand of a single-site initiator framework were synthesized and characterized by spectroscopic methods, X-ray analysis, and DFT calculations. The theoretical study, verified by the experimental data, explains the catalytic behaviour in the ROP of lactide in the examined zinc complexes. The presented simple DFT protocol constitutes a valuable method for the qualification of the ancillary ligand to rationally design new complexes to improve their catalytic activity.

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1039/c7dt00394c>

Strona internetowa wydawcy

<https://www.rsc.org/>