

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

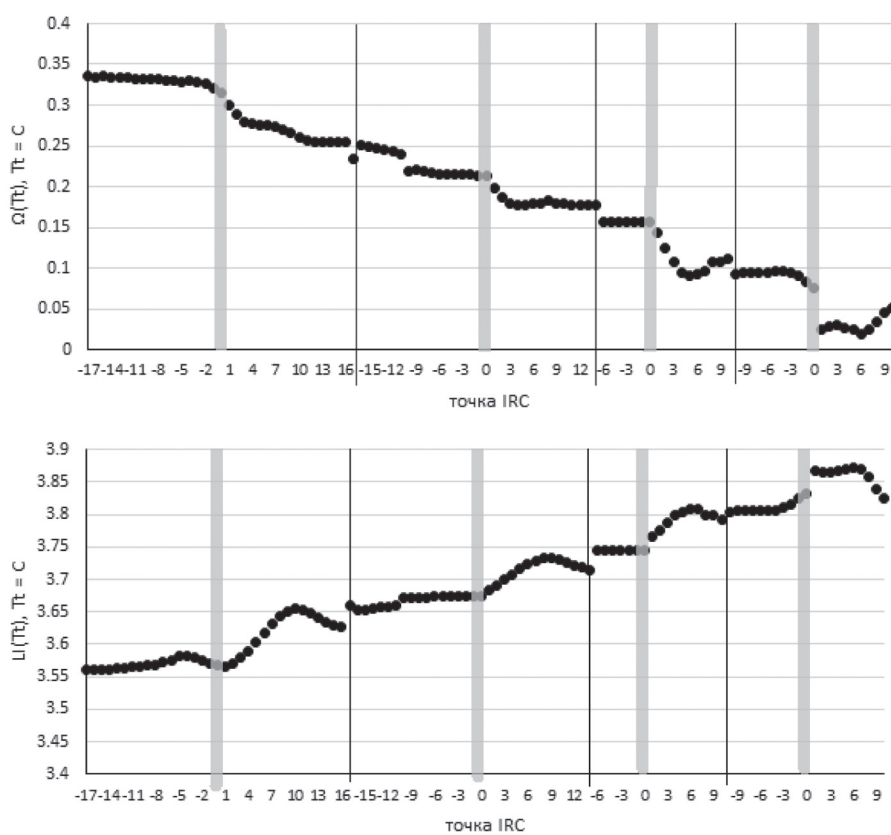


Рис. S1. а) Уменьшение заряда атомного бассейна (e); б) увеличение индекса локализации электронов в атомном бассейне для реакционного центра $Tt = C$ в ходе последовательного замещения Cl на фенил. Вертикальными линиями разделены последовательные стадии, серыми полосами обозначены переходные состояния

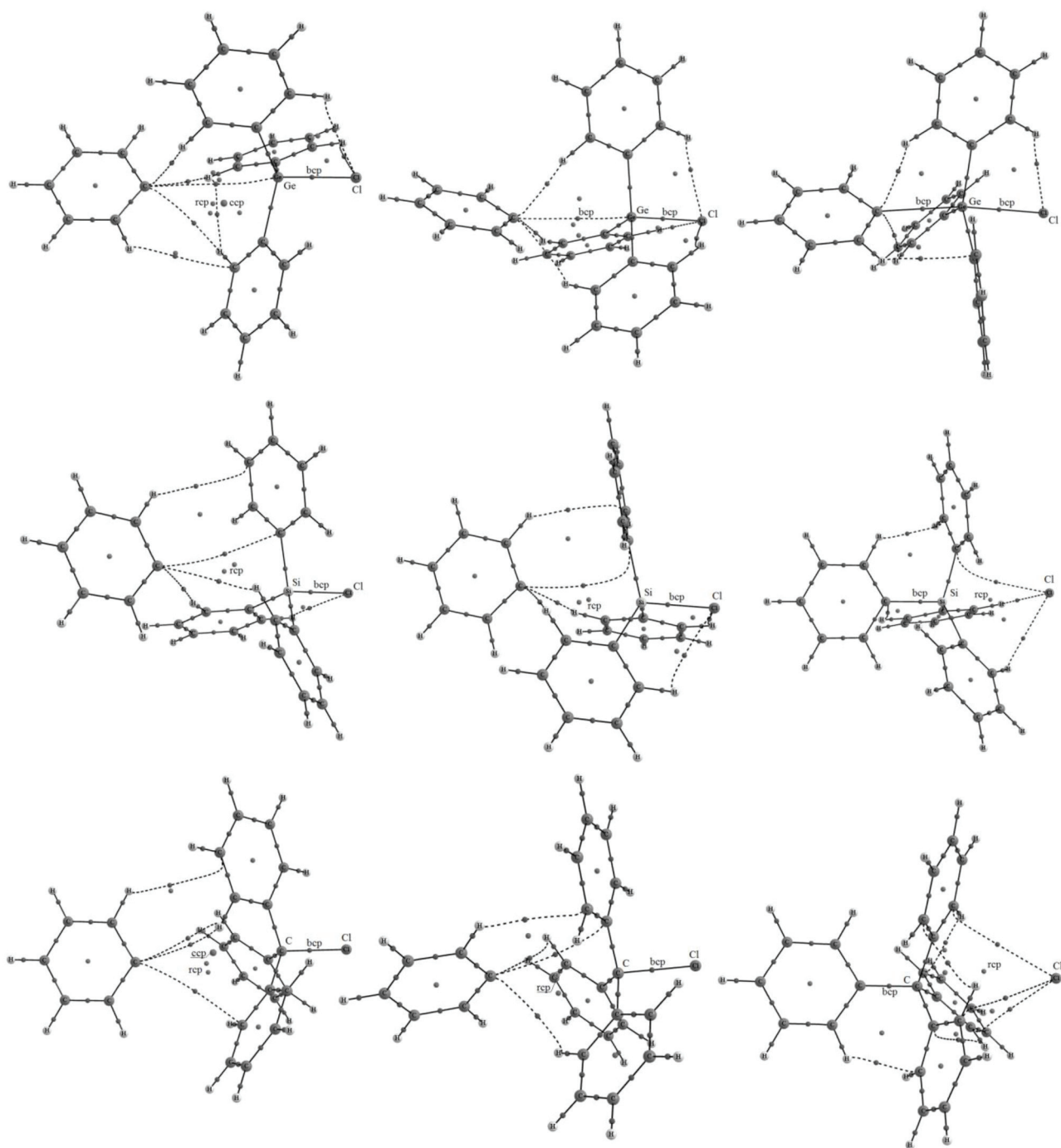


Рис. S2. Изменение значений электронной плотности в критических точках связей и индексов делокализации электронов в зависимости от межатомного расстояния а) Tt = C; б) Tt = Si; в) Tt = Ge

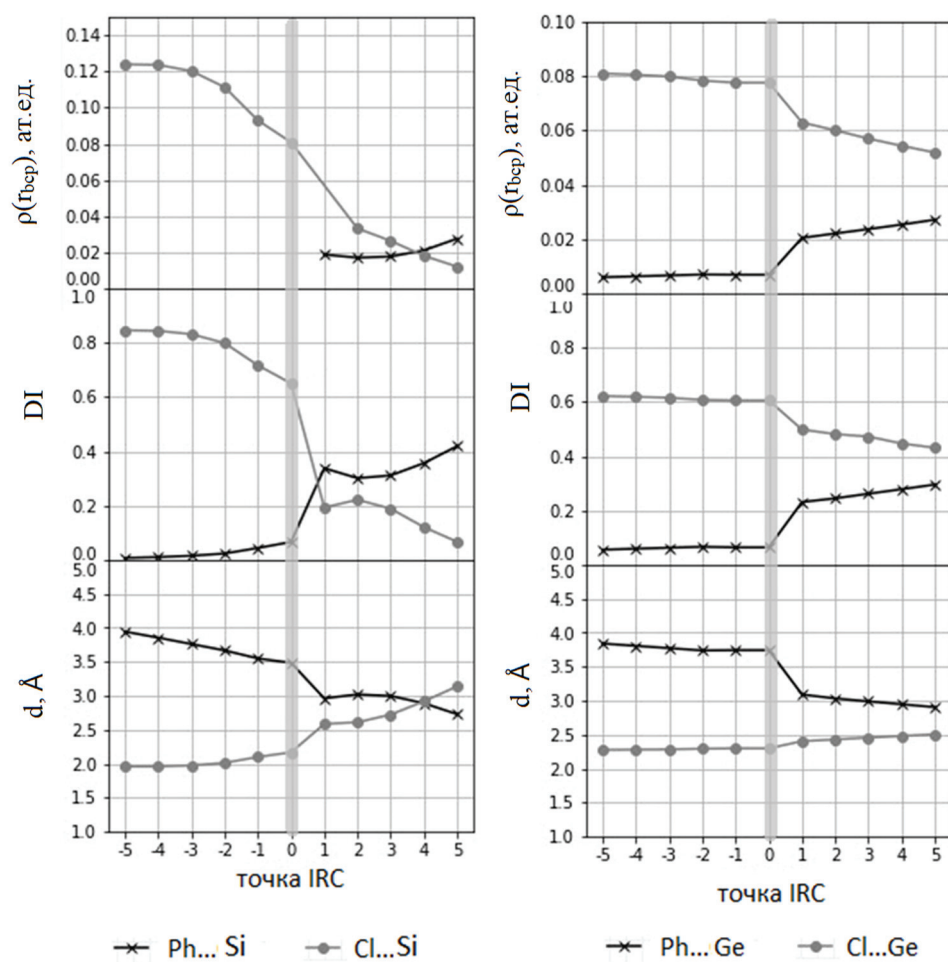


Рис. S3. Значения электронной плотности в критических точках связей, индексов делокализации электронов и межатомных расстояний в точках расчета IRC последней стадии замещения хлора на фенильную группу. Переходные состояния обозначены как 0

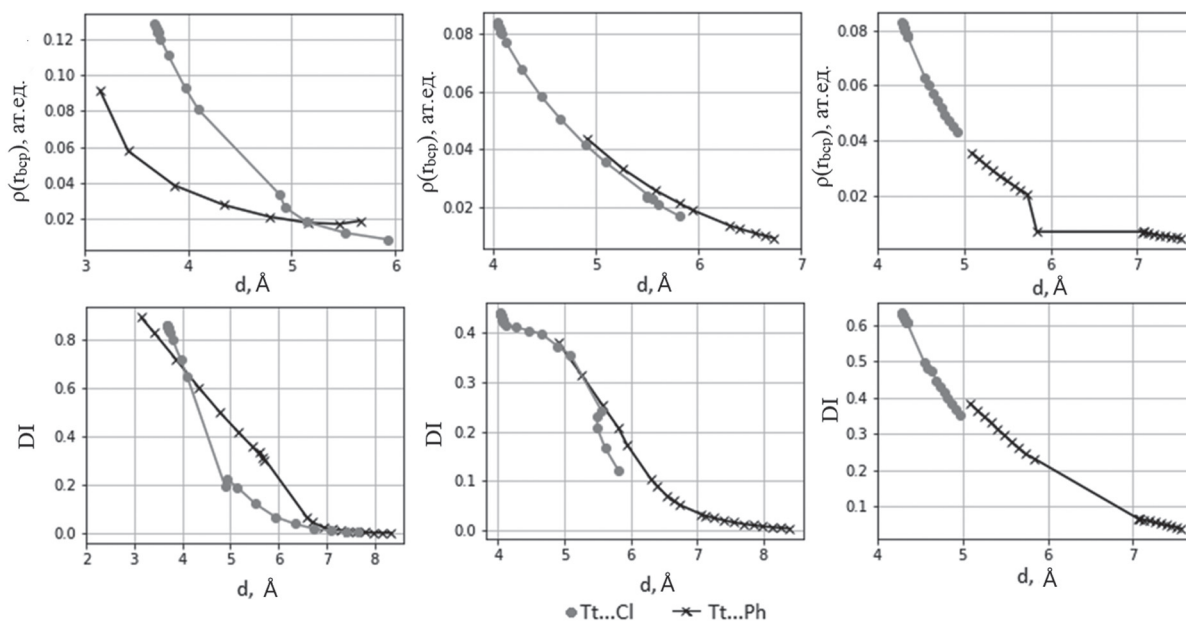


Рис. S4. Критические точки электронной плотности и связевые пути в структуре комплексов для а) исходных состояний, б) переходных состояний и с) продуктов (или интермедиатов) реакции замещения хлора на фенил в трифенилхлорметане (снизу), трифенилхлорсилане (по центру) и трифенилхлоргермане (сверху)

Т а б л и ц а S1

Критические точки электронной плотности (ат.ед.) между реакционными центрами в структуре комплексов реагентов, переходных состояний и продуктов (интермедиатов) на последней стадии замещения хлора на фенильную группу

Tt	Критические точки		Ph...Tt(Ph) ₃ Cl	TS	Tt(Ph) ₄ ...Cl (Tt = C), Ph...Tt(Ph) ₃ ...Cl (Tt = Si, Ge)
C	(3,-1) связи	C(Ph)-Tt	—	—	0.092
		C(Ph)...другие атомы	C(Ph)...C (0.005); C(Ph)...C (0.004); C(Ph)...H (0.005)	C(Ph)...C (0.008); C(Ph)...H (0.009); C(Ph)...H (0.010)	-
		Tt-Cl	0.128	0.081	-
		Cl...другие атомы	—	--	Cl...C (0.009); Cl...C (0.005); Cl...C (0.005);
	(3,+1) цикла	между Tt и Ph	Tt-C-C-C(Ph)-H-C-C (0.003); Tt-C-C-H-C(Ph)-C-C (0.003) Tt-C-C-C(Ph)-C-C (0.003)	Tt-C-C(Ph)-H-C-C (0.007); Tt-C-C(Ph)-H-C-C (0.007)	—
		между Tt и Cl	—	—	Tt-C-C-H-C-C(Ph) (0.012); Cl-C-H-C-C (0.004); Tt-C-C-C-Cl-C-C (0.003)
	(3,+3) клетки		0.002	—	—
Si	(3,-1) связи	C(Ph)-Tt	—	—	0.111
		C(Ph)...другие атомы	C(Ph)...C (0.003); C(Ph)...H (0.011); C(Ph)...H (0.007)	C(Ph)...C (0.007); C(Ph)...H (0.022); C(Ph)...H (0.018)	C(Ph)...C (0.301); C(Ph)...C (0.298); C(Ph)...H (0.014);
		Tt-Cl	0.084	0.077	—
		Cl...другие атомы	Cl...H (0.010)	Cl...H (0.011); Cl...H (0.013)	Cl...H (0.017); Cl...H (0.008); Cl...C (0.006)
	(3,+1) цикла	между Tt и Ph	Tt-C-C(Ph)-H-C-C (0.003); Tt-C-C-H-C(Ph)-C (0.003)	Tt-C-C(Ph)-H-C-C (0.006); Tt-C-C-H-C(Ph)-C (0.006)	—
		между Tt и Cl	—	—	Tt-C-Cl-H-C-C (0.005); Tt-C-C-H-Cl-C (0.005)
	(3,+3) клетки		—	—	—
Ge	(3,-1) связи	C(Ph)-Tt	—	0.007	0.036
		C(Ph)...другие атомы	C(Ph)...H (0.006); C(Ph)...H (0.015); C(Ph)...H (0.015)	C(Ph)...H (0.002); C(Ph)...H (0.017); C(Ph)...H (0.013)	C(Ph)...H (0.010); C(Ph)...H (0.015);
		Tt-Cl	0.083	0.078	—
		Cl...другие атомы	Cl...H (0.012); Cl...H (0.013)	Cl...H (0.012); Cl...H (0.010); Cl...H (0.012);	Cl...H (0.015)
	(3,+1) цикла	между Tt и Ph	Tt-C-C-H-C(Ph) (0.004); Tt-C-C-H-C(Ph) (0.004); Tt-C-C-H-C(Ph) (0.004)	Tt-C-C-H-C(Ph) (0.006); Tt-C-C-H-C(Ph) (0.006); Tt-C-C-H-C(Ph) (0.006)	—
		между Tt и Cl	—	—	-
	(3,+3) клетки		0.004	—	—