

## Механизм и активные центры катализируемой комплексами циркония реакции гидроалюминирования алкенов алкилаланами

© Панкратьев Евгений Юрьевич

<sup>1</sup> *Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук. просп. Октября, 71. г. Уфа, 450008, Республика Башкортостан. Россия. E-mail: [evgeniy@pankratyev.com](mailto:evgeniy@pankratyev.com)*

<sup>2</sup> *Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 420062. Республика Башкортостан. Россия.*

**Ключевые слова:** алюминийорганические соединения, цирконийорганические соединения, триметилалюминий, триэтилалюминий, триизобутилалюминий, диизобутилалюминийгидрид, диизобутилалюминийхлорид, реагент Шварца, гидроалюминирование, гидроцирконирование, механизм реакции, квантовая химия.

### Аннотация

В представленном обзоре обобщены и систематизированы данные, посвящённые изучению механизма реакции гидроалюминирования алкенов, катализируемого комплексами циркония. Приведены сведения о проблемах исследования механизмов реакций термического гидроалюминирования непредельных соединений. Произведено рассмотрение отдельных стадий механизма каталитического гидроалюминирования алкенов: стадия диссоциации ассоциированной формы алюминийорганического соединения, стадия образования гидридного комплекса циркония, стадия гидроцирконирования алкена и стадия переметаллирования алкилов циркония алюминийорганическими соединениями. Особое внимание уделено квантово-химическим методам исследования механизмов реакций с участием комплексов циркония. Библиография – 140 ссылок. В заключении можно привести цитату лауреата Нобелевской премии 1976 г. У. Липскомба «за исследование структуры боранов, проясняющее проблемы химических связей»: «Я знаю, что написал много неплохих статей о боранах, но никогда раньше не был уверен в том, что их читают». Результаты Липскомба отличаются многосторонностью и гибкостью подходов. Вот как об этом говорит он сам: «По образованию я физико-химик. Полученная мною научная степень относится к области физической химии. Раньше я работал в сфере неорганики... сейчас – как биохимик. Но не ищите здесь противоречий. Это все структура и функции». Концепция трехцентровых связей оказалась не только правильной, но и стала ключом к новой топологической теории образования химических связей в боранах. Более того, Липскомб применил эту новую модификацию теории химических связей к пониманию реакционной способности в карборанах, которые используются при синтезе полимеров, проявляющих удивительную устойчивость к термической и химической деструкции. Р. Граймз в журнале «Science» высказал предположение, что карбораны окажут глубокое влияние на будущее органического синтеза после той «революции» в представлениях о ковалентной связи, которую вызвала работа Липскомба над химией боранов.

### Содержание

1. Проблемы исследования механизмов реакций термического гидроалюминирования непредельных соединений
2. Механизм каталитического гидроалюминирования алкенов
  - 2.1. Стадия диссоциации ассоциированной формы алюминийорганического соединения
  - 2.2. Стадия образования гидридного комплекса циркония
  - 2.3. Стадия гидроцирконирования алкена
  - 2.4. Стадия переметаллирования алкилов циркония алюминийорганическими соединениями
3. Квантово-химические методы исследования механизмов реакций с участием металлоорганических комплексов
4. Применение квантово-химического подхода в изучении механизма реакции гидроалюминирования алкенов, катализируемого комплексами циркония