

Донорно-акцепторные и кислотно-основные свойства комплексов с водородными связями и их участие в химических реакциях

© **Самуилов Александр Яковлевич и Самуилов Яков Дмитриевич**

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«Казанский национальный исследовательский технологический университет».

ул. К. Маркса, 68. Казань, 420015. Россия. E-mail: ysamuilov@yandex.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: комплексы с водородными связями, потенциалы ионизации, сродство к электрону, кислотность, основность, реакционная способность.

Аннотация

Многие химические соединения способны образовывать гомо- и гетерокомплексы с водородными связями (спирты, амины, фенолы и так далее), которые способны выступать в качестве реагентов. Существует ряд данных, которые указывают на то, что комплексы с водородными связями являются более активными в химических реакциях, чем мономеры. Причины этого явления, как правило, остаются неизвестными.

В настоящей работе на основе анализа литературных и собственных данных, полученных методом квантово-химических расчетов, показано, что комплексы с водородными связями обладают повышенными донорно-акцепторными и кислотно-основными свойствами по сравнению с мономерами. Это обстоятельство является причиной повышенной реакционной способности комплексов с водородными связями. Это приводит к тому, что многие превращения, которые традиционно относили к простым, оказываются сложными, многоканальными.

Каждое из этих направлений характеризуется своими структурами пред- и послереакционных комплексов, переходных состояний, термодинамическими параметрами активации и реакций.

Реакции с участием комплексов с водородными связями можно рассматривать как автокаталитические. Образующиеся на первой стадии взаимодействия из мономерных молекул комплексы вступают в реакцию. В ходе превращения образуется комплекс с более низкой степенью ассоциации, который с новыми молекулами мономеров образует новый ассоциат с повышенной реакционной способностью.