

РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ СИСТЕМЫ "ХЛОРАНГИДРИД КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ - СПИРТ" В РАСТВОРЕ И НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ФАЗ

Варфоломеева В.В., Терентьев А.В.

Самарский университет, Самара

varf2@ssau.ru

Сегодня значительно возрос интерес к изучению механизмов химических реакций протекающих с участием водородных связей. Неаддитивность водородно-связанной системы способствует появлению новых свойств, ранее не проявляющих себя. Новый взгляд на создание условий для протекания реакций в системе «хлорангидрид карбоновой кислоты – спирт» связан с реакционной способностью образующихся тримолекулярных водородно-связанных комплексов.

Задача исследования заключается в развитии подходов применения каталитической способности водородных связей для поиска энергетически более выгодных путей реакции. На основании детального изучения механизма реакции взаимодействия хлорангидрида карбоновой кислоты и спирта было показано, что один из возможных способов управления отдельным процессом – создание условий для образования водородных связей, которые повлияют на изменение энергетического профиля реакции. Реализация выгодного пути в растворе осуществляется посредством включения в процесс третьего участника реакции: реагент или продукт. При осуществлении каталитической реакции на границе раздела фаз в общей схеме процесса третьим участником выступает адсорбент. При этом для установления новых схем реакции, эффективных и селективных, необходимо чёткое понимание взаимосвязи между структурой поверхности катализатора и реакционной способностью. Решающее влияние на направление и путь протекания реакции оказывают динамические факторы: состав и структура предреакционных комплексов со специфическими взаимодействиями, строение переходного состояния. Вклад внутри- и межмолекулярной водородной связи в структурно-энергетические параметры молекул оценили используя индекс нековалентных взаимодействий (NCI). Методом B3LYP/aug-cc-pVDZ получены свободные энергии активации реакции ΔG^\ddagger .

Научная тематика относится к одному из направлений современных фундаментальных исследований на долгосрочный период (2021 – 2030 годы): «поиск методов контроля химических реакций на уровне отдельных реагирующих молекул».