



06/11/2015

**Научный семинар кафедры органической химии
№ 20**

Преп. СХА 15-00

**ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ И МЕХАНИЗМЫ РЕАКЦИЙ
В ХИМИИ ГИДРИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ
МЕТАЛЛОВ И ЭЛЕМЕНТОВ ГЛАВНЫХ ГРУПП**

Шубина Е. С.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, ул.
Вавилова 28, Москва 119991; shu@ineos.ac.ru*

Гидриды металлов в роли кислот и оснований взаимодействуют с органическими субстратами в реакциях, имеющих большое значение в различных каталитических и биохимических процессах. В последние десятилетия найдены новые типы водородных связей, характерные для гидридов переходных металлов и элементов главных групп, в которых гидридный лиганд является донором (МН..основание) или акцептором (диводородные связи МН...НА) протона. Эти взаимодействия являются первой стадией активации (МН, ЕН связи) и играют важную роль в процессах переноса протона, гидрид-иона и трансформации H_2 в координационной сфере переходных металлов. Водородно-связанные комплексы могут определять направление и селективность реакций, стабилизировать или дестабилизировать образующиеся продукты. Диводородные связи могут быть использованы для дизайна новых композиций и материалов, а также систем хранения водорода.

В лекции будет представлен анализ экспериментальных и теоретических результатов исследований реакционной способности гидридов переходных металлов 5-10 групп и гидридных комплексов элементов 13 группы и рассмотрены следующие вопросы:

1. Природа водородных и диводородных связей с гидридами переходных металлов и гидридами элементов главных групп
2. Структурные, электронные, спектральные критерии образования диводородно-связанных комплексов, способы оценки их энергии и протоноакцепторной способности гидридного лиганда. Особенности бифуркатных диводородных связей.
3. Механизмы реакций гидридов переходных металлов и элементов главных групп, включающих перенос ионов водорода и выделение молекулярного водорода.
4. Влияние природы атома металла, лигандного окружения, среды на кинетические, термодинамические характеристики отдельных стадий процесса и потенциальную поверхность реакции.
5. Диводородные связи и перенос протона между гидридами переходных металлов различной полярности.

06/11/2015

Научный семинар кафедры органической химии

№ 20

Преп. СХА 15-00

Некоторые публикации по теме лекции

1. **E. Shubina**, N. Belkova, O. Filippov, L. Epstein. Weak Interactions and M-H Bond Activation // *Advances in Organometallic Chemistry: The Silver/Gold Jubilee International Conference on Organometallic Chemistry Celebratory Book*, First Edition. Ed.: A. J. L. Pombeiro. John Wiley & Sons, Inc., **2014**, **chapt. 8**, 97-109.
2. N. V. Belkova, L. M. Epstein, O. A. Filippov, **E. S. Shubina**. IR spectroscopy of hydrides and its application to hydrogen bonding and proton transfer studies // *Spectrosc. Prop. Inorg. Organomet. Compd.*, **2012**, *43*, 1–28 (**Глава в книге**).
3. L. M. Epstein, N. V. Belkova, **E. S. Shubina**. «Diverse world of unconventional hydrogen bonds». *Acc. Chem. Res.* **2005**, *38*, 624-631
4. O. A. Filippov, N. V. Belkova, L. M. Epstein, E. S. Shubina. Chemistry of boron hydrides orchestrated by dihydrogen bonds // *J. Organomet. Chem.*, **2013**, *747*, 30-42 (**Review**).
5. N. V. Belkova, L. M. Epstein, **E. S. Shubina** “Dihydrogen Bonding, Proton Transfer and Beyond: What We Can Learn from Kinetics and Thermodynamics” *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2010**, 3555-3565 (**Review**)
6. N. V. Belkova, E. V. Bakhmutova-Albert, E. I. Gutsul, V. I. Bakhmutov, I. E. Golub, O. A. Filippov, L. M. Epstein, M. Peruzzini, A. Rossin, F. Zanobini, **E.S. Shubina** Dihydrogen bonding in complex (PP₃)RuH(η^1 -BH₄) featuring two proton-accepting hydride sites: experimental and theoretical studies // *Inorg. Chem.*, **2014**, *53* (2), 1080–1090.
7. G.A. Silantyev, O.A. Filippov, P.M. Tolstoy, N.V. Belkova, L.M. Epstein, K. Weisz, E.S. **Shubina**. Hydrogen bonding and proton transfer to ruthenium hydride complex CpRuH(dppe): metal and hydride dichotomy // *Inorg. Chem.*, **2013**, *52*, 1787–1797.
8. O.A. Filippov, N.V. Belkova, L.M. Epstein, A. Lledos, **E.S. Shubina**. Directionality of Dihydrogen Bonds: The Role of Transition Metal Atoms // *ChemPhysChem*, **2012**, *13*, 2677-2687.
9. O. A. Filippov, N. V. Belkova, L. M. Epstein, A. Lledos, **E. S. Shubina**. Hydrogen–deuterium exchange in hydride chemistry: Dihydrogen bonded complexes as key intermediates // *Comput. Theor. Chem.*, **2012**, *998*, 129-140.
10. V. A. Levina, A. Rossin, N. V. Belkova, M. R. Chierotti, L. M. Epstein, O. A. Filippov, R. Gobetto, L. Gonsalvi, A. Lledós, **E.S. Shubina**, F. Zanobini, M. Peruzzini. Acid-base interaction between transition metal hydrides results in dihydrogen bonding and assists H₂ evolution // *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2011**, *50*, 1367–1370.
11. V. A. Levina, O. A. Filippov, E. I. Gutsul, N. V. Belkova, L. M. Epstein, A. Lledós, E. S. **Shubina**. Neutral Transition Metal Hydrides as Acids in Hydrogen Bonding and Proton Transfer: Media Polarity and Specific Solvation Effects // *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, *132*, 11234-11246.