

# СТРУКТУРА МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ, ПРИСУТСТВУЮЩИХ В РАСТВОРАХ HF-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO

Е. Г. Тараканова, Г. В. Юхневич

*Учреждение Российской академии наук Институт общей и неорганической  
химии им. Н. С. Курнакова РАН*

Важной задачей химии растворов является установление состава, молекулярного строения и механизма образования устойчивых гетероассоциатов (ГА), определяющих реакционную способность содержащих их двойных жидких систем (ДЖС) HF-Solv (Solv – органический растворитель). В ходе решения этой задачи путем объединенных общей логикой экспериментальных и расчетных исследований показано, что при растворении HF в органических растворителях может образовываться до четырех различных типов прочных ГА, в которых на одну молекулу Solv приходится от 1/2 до 12 молекул HF. Получены данные о молекулярной структуре ГА, доминирующих в ДЖС HF-CH<sub>3</sub>CN, HF-(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>O и HF-ДМФА.

Цель настоящей работы – установление строения стабильных ГА, присутствующих в растворе HF-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO. Для этого экспериментальные значения частот колебаний  $\nu_{\text{HF}}$  ассоциатов со стехиометрическими соотношениями молекул 1 : 1 и 4 : 1 (полученные из спектров растворов разных концентраций с использованием специально разработанных авторских методик) и взаимное расположение этих частот были сопоставлены с соответствующими характеристиками рассчитанных методом функционала плотности (B3LYP/6-31++G(d,p)) спектров комплексов состава 1 : 1, 2 : 2, 4 : 1 и 8 : 2. Проанализированы относительная устойчивость и особенности строения этих ГА, выявлены тенденции комплексообразования в системе HF-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO.

В результате установлено, что наиболее устойчивым ассоциатом в растворах HF в ацетоне является циклический гетеротетрамер (HF)<sub>2</sub>·((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO)<sub>2</sub>, отличающийся от ГА состава 2 : 2 (с симметрией C<sub>2h</sub>), обнаруженных в ДЖС HF-CH<sub>3</sub>CN и HF-ДМФА, тем, что пары его молекул расположены в двух параллельных плоскостях. Наряду с ним при взаимодействии молекул HF и (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO, по-видимому, образуется циклический ГА (HF)<sub>4</sub>·(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CO.