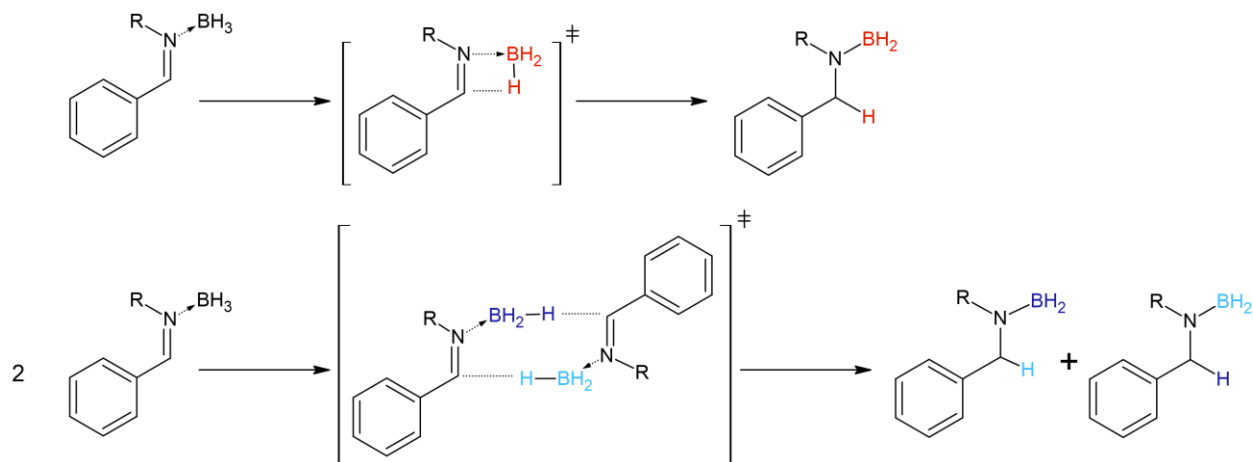


Sinhronost građenja i kidanja veza pri redukciji iminoborana do aminoborana

Prenos hidrida u reakciji iminoborana $\rightarrow$ aminoborana može da se odvija kao intramolekulski proces, ili do njega može doći pri sudaru dva reaktanta, kao što je prikazano na slici.



Upoređivanje ova dva mehanizma može se izvršiti analizom reakcionih sila [1], koje omogućuju razgraničavanje puta minimalne energije na oblasti koje pripadaju reaktantima, prelaznom stanju i proizvodima reakcije. U oblastima reaktanata i proizvoda dolazi pretežno do strukturnih promena, dok je oblast prelaznog stanja ključna za preraspodelu elektronske gustine, odnosno kidanje postojećih i građenje novih veza.

Na osnovu reakcionih sila računaju se reakcione konstante sila, koje omogućuju klasifikaciju reakcija na sinhronne i asinhronne. Poreklo asinhronosti procesa može se objasniti pomoću sprege relativnog gradijenta energije [2] i metodologije interagujućih kvantnih atoma [3], a na osnovu identifikacije dominantnih interakcija koje oblikuju put minimalne energije. Biće pokazano na koji način priroda supstituenata utiče na asinhronost procesa intramolekulskog i intermolekulskog prenosa hidrida u reakciji iminoborana $\rightarrow$ aminoborana.

1. P. Jaque, A. Toro-Labbé, P. Politzer, P. Geerlings, *Chem. Phys. Lett.* 456 (2008) 135
2. J. C. R. Thacker, P. L. A. Popelier, *Theor. Chem. Acc.* 136 (2017) 86
3. M. A. Blanco, A. Martín Mendás, E. Francisco, *J. Chem. Theory Comput.* 1 (2005) 1096