

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ
ТЕТРАЭДРИЧЕСКОГО ПРОМЕЖУТОЧНОГО ПРОДУКТА
В РЕАКЦИЯХ РАСЩЕПЛЕНИЯ ЭФИРОВ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ
1,3-ДИМЕТИЛ-2-(ГИДРОКСИМИНОМЕТИЛ)ИМИДАЗОЛИЙ ЙОДИДОМ**

Михеенко В. М.¹, Сердюк А. А.^{2,3}, Капитанов И. В.^{2,3}

¹Донбасская национальная академия строительства и архитектуры

²Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАНУ

³Таллинский технический университет

ivkapitanov@gmail.com

В реакциях расщепления эфиров уксусной кислоты 1,3-диметил-2-(гидроксиминометил)имидазолий йодидом в щелочных средах возможна реализация двух реакционных маршрутов (см. реакции А и В на схеме 1). При этом ключевым интермедиатом является тетраэдрический промежуточный продукт (ТПП), структура которого определяет направление дальнейших превращений.

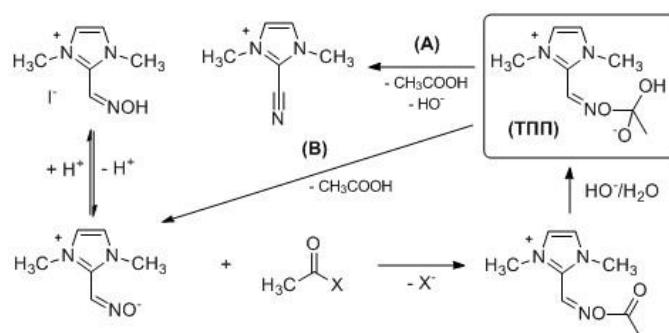


Схема 1

С целью установления особенностей электронной структуры ТПП нами с помощью квантово-химического моделирования в пакете программ Gaussian 09 (базис V3LYP 6-31+G(d); расчет выполнялся с учетом влияния воды как растворителя) проведена оптимизация его структуры (см. рис. 1) и получены ключевые параметры, позволяющие провести моделирование трансформации ТПП в продукты реакции с учетом двух возможных направлений протекания процесса. Было показано, что в стабилизации ТПП большую роль играет образование водородных связей с молекулами воды (между атомами (27)Н... (31)О, (30)Н... (21)О и (36)Н... (16)О; см. рис. 1). Учет наличия этих взаимодействий при расчете структуры ТПП является принципиально важным.

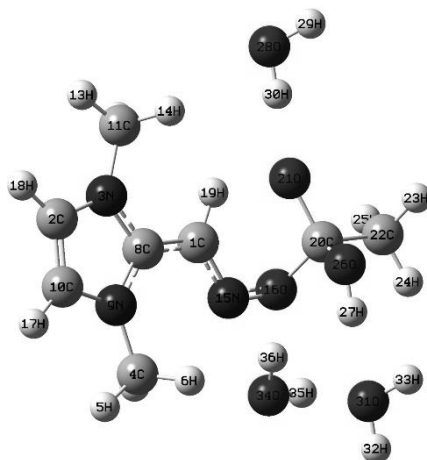


Рис. 1. Оптимизированная квантово-химически структура сольвата ТПП