

## ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СТАБИЛИЗАЦИИ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ РЕАКЦИИ ПРИНСА НА КЛАСТЕРАХ ИЗ УГЛЕРОДНЫХ И БОРНИТРИДНЫХ НАНОТРУБОК

Пасько П. А.<sup>1</sup>, Вакулин И. В.<sup>1</sup>, Зайтунова Г. Г.<sup>1</sup>, Вакулина А. И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

<sup>2</sup>УОР №1, г. В. Пышма, Россия

pasko.pav62@gmail.com

Методами квантовой химии и молекулярной динамики изучена возможность повышения селективности образования 4,4-диметил-1,3-диоксана реакции Принса, который является ключевым полупродуктом в синтезе изопрена по «диоксановому» методу. Нами была рассмотрена стабилизация ПС в кластерах нанотрубок, которые характеризуются дополнительным сайтом стабилизации ПС.

Для построения кластеров использовались нанотрубки с найденным ранее оптимальным диаметром. В таблице представлены сечения полости, возникающей между трубками в кластере при различных расстояниях между стенками трубок.

Сечение полости  $D$  между нанотрубками в зависимости от диаметра трубки и расстояния между стенками, Å.

$d_{opt}$	L (между стенками)			
	3,35	6,00	9,00	12,00
9.49 (BNNT)	12,82	15,89	19,35	22,81
9.52 (CNT)	12,86	15,92	19,39	22,85
10.18 (CNT, BNNT)	13,62	16,68	20,15	23,61
10.85 (BNNT)	14,39	17,46	20,92	24,38
12.23(CNT, BNNT)	15,99	19,05	22,51	25,98

Во всех случаях стабилизация переходного состояния внутри трубки оказывается более выгодной, чем стабилизация в полости между стенками. Это соотношение справедливо вне зависимости от механизма образования гидрированных фуранов и строения нанотрубок.

Интересно отметить, что выгодность стабилизации переходного состояния между стенок также имеет экстремальный характер, однако максимум стабилизации достигается при больших значениях сечения полости по сравнению с диаметром нанотрубки (14–16 Å), а энергия такого варианта стабилизации в 1,5–2 раза меньше.

	(CNT) <sub>7</sub>				(BNNT) <sub>7</sub>			
	$d_{opt}$ , Å	$E_{stab}$	$D$ , Å	$E_{stab}$	$d_{opt}$ , Å	$E_{stab}$	$D$ , Å	$E_{stab}$
ПС <sub>ALK</sub> (бутен-1)	9,52	-43,2	11,14	-8,0	9,49	-42,8	11,11	-20,0
ПС <sub>ALK</sub> (бутен-2)	10,18	-37,9	14,80	-13,0	10,18	-37,9	11,80	-19,7
ПС <sub>DXL</sub> (бутен-1)	12,23	-42,1	13,85	-14,0	12,23	-45,7	13,21	-20,5
ПС <sub>DXL</sub> (бутен-2)	10,18	-53,0	11,80	-24,5	10,85	-49,9	12,47	-25,0