

ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ВОЗМОЖНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ
РЕАКЦИОННЫХ МАРШРУТОВ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
1,3-ДИМЕТИЛ-2-(ГИДРОКСИМИНОМЕТИЛ)ИМИДАЗОЛИЙ ЙОДИДА
С АКТИВИРОВАННЫМИ СЛОЖНЫМИ ЭФИРАМИ

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

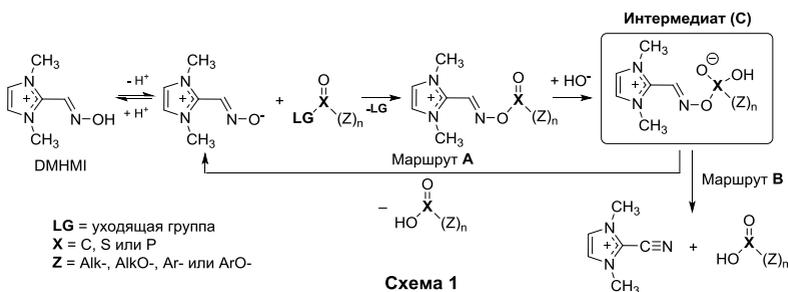
¹Донбасская национальная академия строительства и архитектуры, г. Краматорск

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

³Таллинский технологический университет

vmmikheenko@gmail.com

В процессе взаимодействия щелочных растворов 1,3-диметил-2-(гидроксимино-метил)имидазолий йодида с активированными эфирами кислот углерода, фосфора и серы ключевым интермедиатом, определяющим структуру продуктов реакции, является тетраэдрический промежуточный продукт С (см. схему 1).



С использованием программного пакета Gaussian 09 было выполнено моделирование механизма данной реакции, проанализированы структурные и энергетические параметры интермедиата С для наиболее часто используемых кислотных остатков. Молекулярная структура исследуемых соединений рассчитана с использованием подхода DFT (функционал B3LYP, базисный набор 6-31+G(d)). Конъюгационные и гиперконъюгационные взаимодействия учитывались путем проведения расчетов в программе NBO 5.0.

На примере интермедиата С (при X = P) рассчитаны полные энергии всех участников процесса для реакционных маршрутов А и В (схема 2, 3) и ΔE (разница между энергиями продуктов и исходных веществ). Полученные данные наглядно свидетельствуют о том, что оба маршрута являются термодинамически возможными.

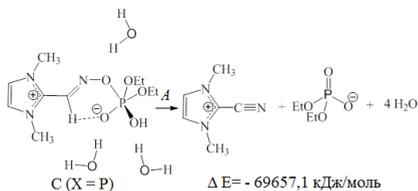


Схема 2

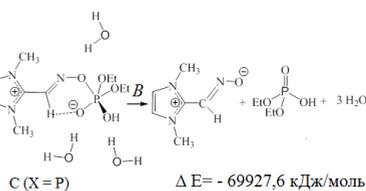


Схема 3