

IX Молодёжная конференция ИОХ РАН

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук
(ИОХ РАН)



IX Молодежная конференция ИОХ РАН, *посвященная 160-летию со дня рождения академика Н.Д. Зелинского*

Научный комитет:

Анаников В.П.	Академик РАН	Максимов А.Л.	член-корр. РАН
Бубнов Ю.Н.	Академик РАН	Никишин Г.И.	член-корр. РАН
Верещагин А.Н.	д.х.н.	Нифантьев Н.Э.	член-корр. РАН
Дильман А.Д.	д.х.н., профессор РАН	Стахеев А.Ю.	д.х.н., профессор
Егоров М.П.	Академик РАН	Пономаренко С.А.	член-корр. РАН
Злотин С.Г.	д.х.н., профессор	Тартаковский В.А.	Академик РАН
Иванов В.К.	член-корр. РАН	Терентьев А.О.	член-корр. РАН
Калмыков С.Н.	член-корр. РАН	Трифонов А.А.	член-корр. РАН

Организационный комитет:

Председатель: Егоров М.П., академик, директор ИОХ РАН

Заместители председателя: к.х.н. Яременко И.А., д.х.н. Ферштат Л.Л.

Барсегян Я.А.	асп.	Князева Е.А.	к.х.н.
Битюков О.В.	к.х.н.	Крылов В.Б.	к.х.н.
Борисов Д.Д.	к.х.н.	Ларин А.А.	к.х.н.
Виканова К.В.	к.х.н.	Максименко А.С.	асп.
Виль В.А.	к.х.н.	Попов М.В.	к.т.н.
Ерохин К.С.	асп.	Прима Д.О.	к.х.н.
Жарков М.Н.	к.х.н.	Сильянова Е.А.	асп.
Измestьев А.Н.	к.х.н.	Фролов Н.А.	асп.

Спонсоры конференции:



11–12 ноября 2021 г.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ И КИНЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МЕХАНИЗМА ОБРАЗОВАНИЯ 2-МЕТИЛИМИДАЗОЛА

В. П. Тугульдурова, О. В. Водянкина, А. В. Фатеев

Национальный исследовательский Томский государственный университет

634050 Томск, пр. Ленина, 36. E-mail: tuguldurova91@mail.ru

Необходимость исследования механизма реакции глиоксаля, ацетальдегида и аммиака с образованием 2-метилимидазола (2МИ) в растворе обусловлена образованием вторичных органических аэрозолей, оказывающих негативное влияние на глобальный климат, качество воздуха и здоровье человека [1], а также недостатком сведений о механизмах образования имидазолов, широко используемых в различных сферах человеческой деятельности.

Квантово-химические расчеты проводились с использованием программного пакета Gaussian'16, инсталлированного на кластере ANNEMARIE Марбургского университета им. Филиппа на уровне теории B3LYP-D3/6-311G(d,p) в сочетании с подходом, основанном на замене низкочастотных энтропийных вкладов для расчета свободной энергии Гиббса молекул в растворе [2].

Установлено, что механизм образования 2-метилимидазола состоит из ряда последовательных превращений интермедиатов ациклической и циклической структуры, при этом наиболее вероятный маршрут образования имидазольного цикла заключается в конденсации аминных интермедиатов. Сопоставление результатов эксперимента [3] с теоретическими данными показывает, что предположенные аминные промежуточные соединения, имеющие низкие положения на ППЭ, содержат обнаруженные экспериментально фрагменты ($-\text{CH}-\text{CH}_3$; $-\text{NH}_2$; $-\text{C}=\text{O}$). Лимитирующей стадией образования 2МИ является циклизация предциклического интермедиата путем внутримолекулярной нуклеофильной атаки аминным атомом азота слабоэлектрофильного атома углерода с выделением молекулы воды по типу механизма $\text{S}_{\text{N}}2$, характеризующаяся $\Delta G^\ddagger = 23,4$ ккал/моль. Экспериментальное исследование влияния порядка смешения реагентов с привлечением ЯМР-спектроскопии подтвердил квантово-химически обоснованный предпочтительный путь образования 2МИ при взаимодействии двух аминных интермедиатов.

Список литературы:

1. Shi X., Zhang R., Sun Y., Xu F., Zhang Q. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, 20, 1005–1011.
2. Tuguldurova V.P., Fateev A.V., Poleshchuk O.Kh., Vodyankina O.V. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2019**, 21, 9326–9334.
3. Tuguldurova V.P., Kotelnikov O.A., Cheltygmasheva R.S., Kotov A.V., Fateev A.V., Bakibaev A.A., Vodyankina O.V. *J. Struct. Chem.* **2020**, 61, 225–231.