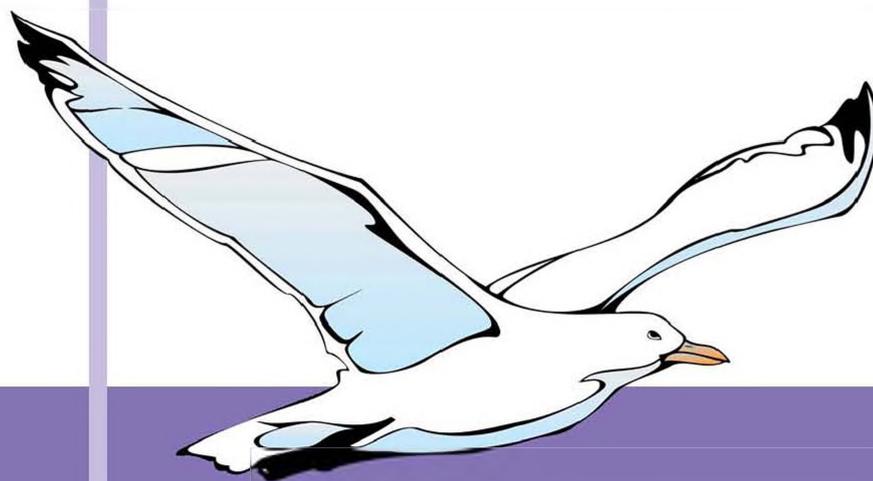


ТУАПСЕ 2015

# Современная химическая физика

XXVII Симпозиум



сборник  
тезисов

20 сентября – 1 октября, 2015 года  
Пансионат «Маяк», г. Туапсе

## Кинетическое изучение взаимодействия ацетальдегида и аммиака

Тугульдурова В.П.<sup>1</sup>, Фатеев А.В.<sup>1,2</sup>, Мальков В.С.<sup>1</sup>, Водянкина О.В.<sup>1</sup>

1. НИ ТГУ, Томск

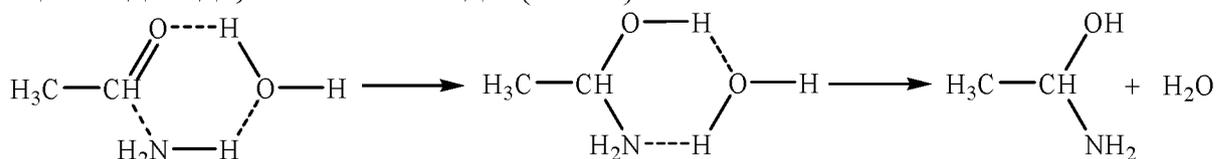
2. ТГПУ, Томск

Реакции взаимодействия карбонильных соединений с аммиаком и его производными лежат в основе синтеза ряда ценных гетероциклических соединений. Но, несмотря на это, данные процессы остаются недостаточно изученными с точки зрения химической кинетики и механизмов реакций. В связи с этим, целью настоящей работы стало изучение кинетических закономерностей и механизмов взаимодействия ацетальдегида и аммиака, продуктом которого является тригидрат 2,4,6-триметил-1,3,5-гексагидротриазина (тример ацетальдегида-аммиака).

В работе был осуществлен синтез данного соединения, вследствие его неустойчивости для идентификации и подтверждения его структуры проводились только ИК-спектроскопический анализ и определение температуры плавления. Дополнительное подтверждение структуры было получено за счет проведения квантово-химических расчетов колебательных спектров 2,4,6-триметил-1,3,5-гексагидратриазина, обнаружено почти полное совпадение основных полос поглощения расчетных и экспериментальных данных, достигнутое за счет введения скалирующего фактора  $SF = 1,06$ .

Для определения модели кинетической зависимости ацетальдегида в данной реакции был проведен ряд экспериментов с использованием спектрофотометрической установки *in situ*. Выполнен расчет кинетических параметров с применением классических кинетических выводов для реакции обратимого взаимодействия двух компонентов.

В настоящей работе методом B3LYP/6-311++G\*\* проведено моделирование первой стадии реакции взаимодействия ацетальдегида и аммиака. Найдено переходное состояние первой стадии реакции – непосредственного нуклеофильного присоединения аммиака к ацетальдегиду с образованием 1-аминоэтанола. Обнаружена решающая роль молекулы воды в переносе протона в шестичленном цикле, сформированном из молекул ацетальдегида, аммиака и воды (схема).



Получены энергии активации для каждого этапа превращения. Результаты нахождения подтверждены наличием одной мнимой частоты.