

*Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова
Российский фонд фундаментальных исследований
Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН
Научный совет по химическому строению и реакционной способности РАН
НОЦ "Химическая физика биохимических и биологических процессов"
НОЦ "Химия высоких энергий"*

**XXXVI Всероссийский симпозиум
молодых ученых по химической
кинетике**

Сборник трудов

(18-21 марта 2019 г.)

УДК 544.4
ББК 24.5

а

XXXVI Всероссийский симпозиум молодых ученых по химической кинетике. Сборник трудов. Под редакцией Мельникова М.Я., Верной О.И., Москва: Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, 2019. – 170 с.

ISBN 978-5-91556-506-6

В сборнике представлены работы, освещающие современное состояние теоретических и экспериментальных исследований по следующим направлениям:

- катализаторы: синтез, структура, активность;
- наноматериалы: синтез и свойства;
- моделирование химических, физических, биологических процессов;
- кинетические закономерности протекания химических, физических, биологических процессов;

Школа-симпозиум организована при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 19-03-20004).

XXXVI Всероссийский симпозиум молодых ученых по химической кинетике

*Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова
Российский фонд фундаментальных исследований
Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН
Научный совет по химическому строению и реакционной способности РАН
НОЦ "Химическая физика биохимических и биологических процессов"
НОЦ "Химия высоких энергий"*

XXXVI Всероссийский симпозиум молодых ученых по химической КИНЕТИКЕ

Сборник трудов

(18-21 марта 2019 г.)

2019 год

ОРГКОМИТЕТ

Председатель – д.х.н. профессор М.Я. Мельников

Зам. председателя – д.х.н. профессор Б.Р. Шуб

Ученый секретарь – к.х.н. О.И. Верная

Члены оргкомитета: – к.х.н. А.В. Богданов, к.х.н. И.Н. Кротова, к.х.н. Д.А. Помогайло.

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель – профессор М.Я. Мельников

Зам. председателя – академик А.Л. Бучаченко

Члены программного комитета:

Академик С.М.Алдошин, академик А.А.Берлин, академик А.Л.Бучаченко, академик М.П.Егоров, академик В.В.Лунин, академик В.И.Минкин, профессор В.А.Надточенко, профессор А.Х.Воробьев, профессор Б.Р. Шуб, д.х.н. И.Г.Тарханова, д.х.н. Т.Н.Ростовщикова, д.х.н. Е.Н.Голубева, д.х.н. Т.И.Шабатина, к.х.н. Н.А. Чумакова, к.х.н. М.И. Шилина,

Школа-симпозиум организована при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 19-03-20004\19).

Изучение молекулярной структуры 4-пиперидинметанола в твёрдом состоянии и в растворе тетрахлорметана

¹Корнейчук А.Я., Курамшина Г.М., Сенявин В.М.

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова
Химический факультет, Москва, andreykorn1990@gmail.com

Как известно, молекула пиперидина может претерпевать как инверсию цикла, так и инверсию атома азота. Для незамещенного пиперидина значения барьеров инверсий составляют порядка 10,4 ккал/моль и 6,1 ккал/моль соответственно [1,2].

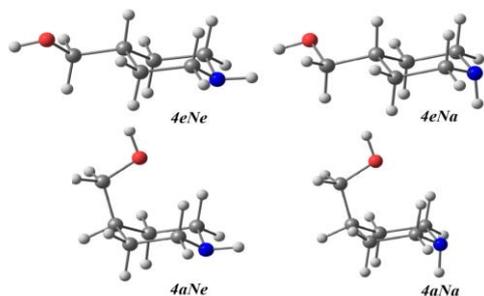


Рис. 1. Оптимизированные структуры конформеров 4-пиперидинметанола (BVP86/TZVP)

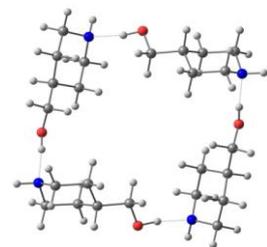
Появление гидроксильной группы, в качестве заместителя, может стабилизировать аксиальную ориентацию за счёт образования прочной внутримолекулярной или межмолекулярной связи. Поэтому целью данной работы является квантово-химическое рассмотрение на современном теоретическом уровне строения, колебательного спектра и молекулярного силового поля 4-пиперидинметанола (далее, 4-ПМ) и, с помощью полученных данных, интерпретация ИК-спектра исследуемого вещества в твёрдом состоянии и в растворе тетрахлорметана.

Наиболее устойчивые структуры четырёх конформеров 4-ПМ представлены на рисунке 1. Все расчёты были выполнены с помощью программы Gaussian 09 (Версия C.01) [3]. Относительные энергии (ккал/моль) конформеров 4-ПМ приведены в табл. 1.

Табл. 1. Относительные энергии 4 конформеров 4-МП, ккал/моль

		4eNe	4eNa	4aNe	4aNa
B3LYP	6-31G*	0,0	0,27	1,86	2,19
	aug-cc-pVTZ	0,0	0,72	2,58	3,33
	aug-cc-pVDZ	0,0	0,83	2,61	3,47
M062X	6-31+G**	0,0	0,55	2,00	2,65
BVP86	TZVP	0,0	0,44	3,78	3,91

Анализ полученных ИК-спектров показал, что раствор



4-ПМ в CCl₄ представляет собой равновесную смесь наиболее устойчивых конформеров 4eNe и 4eNa. В то время как в твёрдом состоянии исследуемое соединение представляет собой цепочку связанных конформеров 4eNe, соединённых благодаря образованию межмолекулярной водородной связи OH...N. На рисунке слева представлена структурная формула наиболее устойчивого тетрамера 4-пиперидинметанола (BVP86/TZVP).

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 18-03-00412

- [1] Eliel E.L., Allinger N.L., Angyal S.J., Morrison G.A. // *Conformational Analysis*, Wiley, New York, 1965. P. 245.
 [2] Allinger N.L., Carpenter J.G.D., Karkowski F.M. // *Tetrahedron Lett.* 1964; P. 3345.
 [3] Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. // *Gaussian 09, Revision C.01*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.