

Тематическое направление: Квантово-химический расчет некоторых элементарных актов реакций кислотно-каталитического разложения гидропероксида кумола. Часть 1.

## Протонизация гидропероксида кумола

© Дахнави Эльдар Мусаевич\*<sup>+</sup> и Чачков Денис Владимирович

Кафедра общей химической технологии. Казанский государственный технологический университет.

Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 231-42-52. E-mail: [dahnavi@rambler.ru](mailto:dahnavi@rambler.ru)

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** квантово-химический расчет, гидропероксид кумола, кислотно-каталитическое разложение, фенол, ацетон, диметилфенилкарбинол,  $\alpha$ -метилстирол.

### Аннотация

Кислотно-каталитическое разложение гидропероксида кумола протекает с высокой скоростью через последовательное образование промежуточных интермедиатов, детектирование которых физическими методами затруднено. Проведение квантово-химического исследования данного процесса позволило установить наличие различных устойчивых конформаций гидропероксида кумола, отличающиеся механизмами их дальнейшего превращения. В работе предложена возможность протонизации по обоим атомам (алкоксильного и гидроксильного) кислорода гидропероксида кумола разных конформаций. Найдено, что при протонизации гидроксильного кислорода гидропероксида кумола дегидратация последнего сопровождается синхронной перегруппировкой иона оксония в ион карбония, который далее взаимодействует со второй молекулой гидропероксида с образованием промежуточного комплекса, разлагающегося в фенол, ацетон и ион карбония. В случае протонизации алкоксильного атома кислорода отщепляется пероксид водорода с образованием карбокатиона, который превращается в  $\alpha$ -метилстирол или в диметилфенилкарбинол.