

Квантовохимическое изучение образования 1,3-диоксанов из димера формальдегида и алкенов

© Купова⁺ Ольга Юрьевна, Вакулин Иван Валентинович,
Талипова Гузалия Рафаиловна и Талипов* Рифкат Фаатович

Кафедра биоорганической химии. Башкирский государственный университет.
Ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия.
Тел.: (347) 272-63-70. Email: olgakupova@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ab initio* расчет, переходное состояние, реакция Принса, 1,3-диоксаны, олигомеры формальдегида, алкены.

Аннотация

С использованием приближения MP2(fc)/6-31G(d,p) изучены особенности присоединения димера формальдегида к алкенам с образованием алкилзамещенных 1,3-диоксанов в условиях реакции Принса в газовой фазе. Найдено строение переходных состояний и ключевых интермедиатов, определены термодинамические параметры реакции. Показано, что 1,3-диоксаны преимущественно образуются из π -комплекса, полученного в результате взаимодействия димера формальдегида с алкенами, без промежуточного образования σ -комплекса. При этом трансформация π -катиона может рассматриваться как псевдосинхронный процесс.