

Образование самоассоциатов акрилонитрила

© Зайцева* Валентина Васильевна, Тюрина Татьяна Григорьевна
и Зайцев⁺ Сергей Юрьевич

Кафедра химии. Московская государственная академия ветеринарной медицины и биотехнологии
имени К.И. Скрябина. Ул. Академика Скрябина, 23. г. Москва, 109472. Россия.
Тел.: (499) 237-42-81. E-mail: valzaitseva@mail.ru, s.y.zaitsev@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: расчет АМ1, акрилонитрил, самоассоциаты, ЯМР спектроскопия (¹H, ¹³C).

Аннотация

Полуэмпирическим методом АМ1 предварительно рассчитаны структуры линейных и циклических самоассоциатов акрилонитрила в виде димеров, которые доказаны ЯМР ¹H и ¹³C спектроскопией. Константы самоассоциации, определенные по данным химического сдвига *транс*- и *цис*-водорода в =CH₂ и углерода в =CH изомеров акрилонитрила, составляют ~0.070 – 0.103 л/моль. Это означает, что при концентрации акрилонитрила 0.6-3.5 моль/л в смеси доля самоассоциированных молекул не превышает 4-35%. Предложено для расчета величин константы самоассоциации акрилонитрила и других виниловых мономеров использовать химический сдвиг углерода в группе =CH. Полученные результаты важны для определения оптимального состава смеси двух и более мономеров, описания механизма начальной стадии сополимеризации и прогнозирования синтеза конечного продукта с заданным распределением звеньев мономера в макромолекулярной цепи.