

Изучение механизма получения диизопропилсульфоксида из диизопропилсульфида

© **Гарифзянова Гюзель Габдульбаровна**

*Кафедра катализа. Казанский национальный исследовательский технологический университет.
ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 231-89-41. E-mail: garifz@kstu.ru*

Ключевые слова: квантово-химический расчет, диизопропилсульфоксид, метод PBE, метод QM_N3, диизопропилсульфид.

Аннотация

В данной работе приводятся результаты квантово-химического изучения механизма получения диизопропилсульфоксида. Из литературы известно, что многие сульфоксиды можно получать окислением диалкилсульфидов в присутствии различных кислот. Целью данного исследования было компьютерное моделирование механизма взаимодействия диалкилсульфидов с перекисью водорода для определения роли катализа в данном процессе. В качестве исходного соединения был выбран диизопропилсульфид. На первой стадии расчеты проводились с использованием программы PGrida и полуэмпирического метода функционала плотности QM_N3 разработанного Дмитрием Лайковым. Был проведен поиск переходных состояний, а также спусков по координате реакции. Были локализованы минимумы, которые соответствуют реагентам и продуктам с использованием оболочки P-AutoExtremum и метода QM_N3. Затем найденные геометрические параметры переходных состояний пересчитывались методом GGA PBE в той же программе PGrida. Рассчитаны энтальпии активации изучаемых реакций. Проведено сравнение полученных результатов двумя этими методами. Была изучена реакция диизопропилсульфида с двумя молекулами перекиси водорода. Метод QM_N3 достаточно быстро рассчитывает переходные состояния, но значительно завышает барьеры реакций, как показывают проведенные расчеты. Так по данным метода QM_N3 энтальпия активации реакции диизопропилсульфида с одной молекулой перекиси водорода составила 202.9 кДж/моль, в то время как метод PBE дает значение 81.4 кДж/моль. Однако оба метода показывают, что добавление второй молекулы перекиси водорода уменьшает барьер. Энтальпия активации процесса составляет 33.7 кДж/моль по данным метода PBE. При этом одновременно перекись водорода является реагентом и катализатором.