

Квантово-химическое моделирование переноса атома водорода в мономере и димере N-изопропилакриламида

© Гарифзянова*⁺ Гюзель Габдульбаровна и Герасимов Александр Викторович

Кафедра интеллектуальных систем и управления информационными ресурсами.

Казанский национальный исследовательский технологический университет.

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

Тел.: +7 (843) 231-89-41. E-mail: garifz@kstu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квантово-химический расчет, переходное состояние, метод B3LYP, N-изопропилакриламид, димер.

Аннотация

В данной работе приводятся результаты квантово-химического изучения внутримолекулярного водородного перехода в мономере N-изопропилакриламида. Известно, что водорастворимый N-изопропилакриламид (ИПАА) является мономером, обладающим подвижным атомом водорода. Проведено компьютерное моделирование мономолекулярного перехода атома водорода от азота к кислороду в мономере ИПАА. Расчеты проводились с использованием пакета программ *Gaussian09*. Методом «мягкого сканирования» был проведен первоначальный поиск переходного состояния. Затем проверили найденную структуру переходного состояния на наличие первой мнимой частоты колебания. Были осуществлены спуски по координате реакции и локализованы минимумы, которые соотнесены к реагентам и продуктам с использованием программы *GaussView*. В результате перехода образуется молекула (E)-N-изопропилакриламида. Двугранный угол $\angle\text{HOCN}$ в полученной молекуле (E)-N-изопропилакриламида составляет 0 градусов. Энергетический барьер реакции составил 160.1 кДж/моль (метод B3LYP/6-311++G(d,p)). Полученные данные моделирования показывают, что образование (E)-N-изопропилакриламида при мономолекулярном переходе водорода в газообразном состоянии энергетически не выгодно. Был проведен расчет энтальпии реакции и энергии Гиббса реакции радикала мономера ИПАА с молекулой димера ИПАА. Энтальпия данной реакции равна 4.3 кДж/моль, то есть обратная реакция с образованием мономера ИПАА является слабо эндотермической. Фактически речь следует вести о равновесной реакционной системе.