

# ИССЛЕДОВАНИЕ АКТИВАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА В ТРИФТОРУКСУСНОЙ КИСЛОТЕ

В. Н. Солкан

*Учреждение Российской академии наук Институт органической химии  
им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва*

Ранее было показано [1], что трифторуксусная кислота (ТФА) не только растворяет молекулярный кислород, но и активирует его при 20-25 °С и атмосферном давлении. Его высокая реакционная способность была обнаружена при взаимодействии с SO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CO, NO, NO<sub>2</sub>. Проведенное нами [2] теоретическое рассмотрение позволяет сделать вывод, что активными интермедиатами реакции окисления различных субстратов молекулярным кислородом в среде ТФА могут быть гидропероксильные радикалы, либо радикальные пары CF<sub>3</sub>COO• + OOH•. Однако, радикал CF<sub>3</sub>COO• может взаимодействовать с H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> по схеме: H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CF<sub>3</sub>COO• = CF<sub>3</sub>COO<sup>-</sup> + H<sub>2</sub>O<sub>2</sub><sup>+•</sup>, и после депротонирования катион-радикала: H<sub>2</sub>O<sub>2</sub><sup>+•</sup> + CF<sub>3</sub>COOH = CF<sub>3</sub>COOH<sub>2</sub><sup>+</sup> + HO<sub>2</sub>• в системе возможно образование радикалов HO<sub>2</sub>•, рекомбинация которых приводит к соединению HOOOH. Нами были проведены неэмпирические расчеты методом MP2 термодинамических параметров указанной последовательности элементарных реакции с учетом влияния сольватации методом РСМ и установлено, что данные элементарные реакции экзотермичны или слабо эндотермичны. Показано, что HOOOH легко распадается с образованием синглетного кислорода и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Таким образом, именно CF<sub>3</sub>COO• возвращает ТФА кислотную функцию, а образование синглетного кислорода обуславливает окислительную активность. Найдено, что при катионной полимеризации диоксида углерода с участием интермедиата HOO(+) возможно существенно снизить эндотермичность реакции полимеризации по сравнению с радикальной полимеризацией. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 08-03-00388-а).

1. Вишнецкая М.В., Якимова И.Ю., Сидоренкова И.А. *Журн. Физ. Химии*. **2006**. – № 2. – С.236-238.
2. Солкан В. Н., Жидомиров Г. М., Мельников М. Я., *Химическая Физика*. **2010**. Т. 29. N 10. С. 14-17.