

РЕАКЦИЯ РАСПАДА ЦИКЛОПЕНТАДИЕНОНА, ИНИЦИИРОВАННАЯ АТОМОМ ВОДОРОДА

©2016 А.Р. Гильдина¹, А.Д. Олейников¹, А.М. Мебель², В.Н. Азязов^{1,3}

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва

²Международный университет Флориды, Майами, США

³Самарский филиал Физического института имени П.Н. Лебедева РАН

DECOMPOSITION OF CYCLOPENTADIENONE, INITIATED BY HYDROGEN

Ghildina A.R., Oleinikov A.D. (Samara National Research University, Samara, Russian Federation),

Mebel A.M. (Florida International University, Miami, Florida, USA),

Azyazov V.N. (Lebedev Physical Institute, Samara, Russian Federation)

*The reaction C_5H_4O+H is the important step in the process of degradation of polycyclic and monocyclic aromatic radicals. The geometries, vibrational frequencies, potential energies of the reagents, products and intermediates and transition states of this reaction has been calculated with the help of the quantum chemical CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-f12/B3LYP/6-311G** method.*

The results show that the reaction goes with the addition of hydrogen to cyclopentadienone, followed by isomerization and decomposition to carbon monoxide and C_4H_5 isomer. Afterwards, C_4H_5 decomposes into $C_4H_4 + H$, and $C_2H_3 + C_2H_2$. This degradation prevents production of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), which are precursors of soot in combustion systems.

В промышленном энергетическом комплексе часто встречается такое явление как неполное сгорание углеводородов, которое способствует образованию соединений из семейства полициклических ароматических углеводородов (ПАУ), а также сажи [1, 2].

Целью данной работы являлось нахождение путей и продуктов реакции циклопентадиенона с атомом водорода на основе ab initio квантовохимических расчётов.

На рис. 1 представлены пути реакции $C_5H_4O + H$ с рассчитанными потенциальными энергиями реагентов, продуктов, промежуточных и переходных состояний. Результаты расчётов показывают, что реакция идёт присоединением H к циклопентадиенону, с последующей изомеризацией и отрывом CO, дающем C_4H_5 изомеры. C_4H_5 впоследствии распадаются на $C_4H_4 + H$ или $C_2H_3 + C_2H_2$. Жирной сплошной кривой показан путь реакции, приводящий к образованию CO.

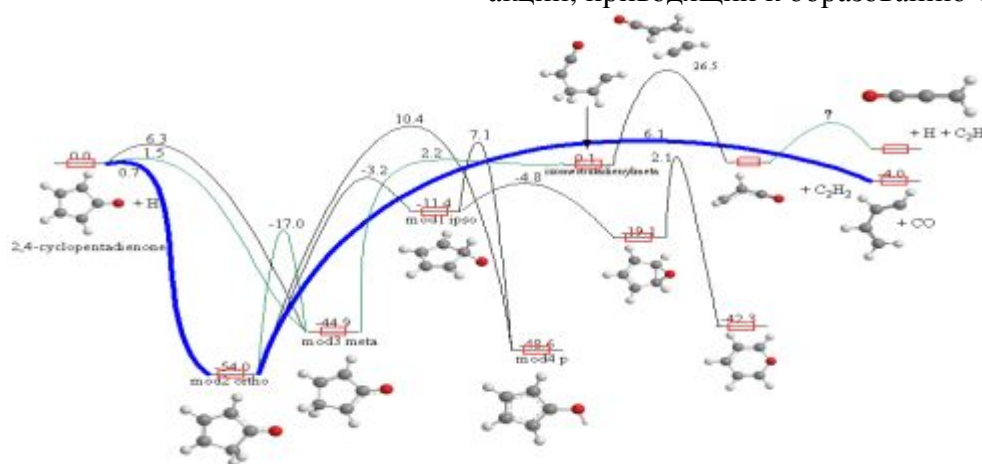


Рис.1. Поверхность потенциальной энергии для цепочки реакций $C_5H_4O + H \rightarrow C_4H_5 + CO$

Библиографический список

1. Tokmakov I.V., Kim G.S., Kislov V.V., Mebel A.M., Lin M.C. The Reaction of Phenyl Radical with Molecular Oxygen: A G2M Study of the Potential Energy Surface. Phys. Chem. A, 2005. 109(27), P. 6114–6127.

2. Parker D.S.N., Kaiser R.I., Troy T.P., Kostko O., Ahmed M., Mebel A.M. Toward the Oxidation of the Phenyl Radical and Prevention of PAH Formation in Combustion Systems. The Journal of Physical Chemistry A, 2014. 119(28), P. 7145-7154.