**Изучение кинетики и механизма реакции**

**азид-алкинового циклоприсоединения «в массе»**

***Алешин Р.П.***

*Студент, 5 курс специалитета*

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия*

*E-mail: msizhir-kniga@mail.ru*

Реакция азид-алкинового циклоприсоединения (ААЦ) в растворах широко изучается для нужд медицинской химии [1]. ААЦ «в массе» (т.е. без растворителя) используется для получения витримеров и адгезивов на основе поли–1,2,3–триазолов, а также для синтеза гетероциклических соединений в соответствии с принципами «зелёной химии» [2].

Известны два возможных механизма реакций 1,3-диполярного циклоприсоединения: согласованный, предполагающий наличие циклического переходного состояния, и пошаговый, заключающийся в образовании ациклического интермедиата [3]. Кинетика и механизм реакций ААЦ «в массе» при всей их значимости остаются неизученными.

В нашей работе было показано, что ААЦ «в массе» протекает с образованием двух региоизомеров. Детальный анализ кинетики реакции с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) демонстрирует близость значений энергии активации для обоих параллельных процессов (*E*1 = *E*2 = 82 ± 1 кДж∙моль−1) (Рис. 1). Кинетика ААЦ была описана в рамках реакционной модели 2-го порядка. Рассчитанные значения энтропии активации для конкурирующих процессов
(Δ*S*1≠ = −115 ± 1 Дж∙моль−1∙K−1, Δ*S*2≠ = −119 ± 1 Дж∙моль−1∙K−1) соответствуют согласованному механизму протекания реакции.

  

Рис. 1. **А** Схема изученной реакции; **B** ДСК-кривые реакции ААЦ (подписи кривых соответствуют скоростям нагрева); **C** Зависимости эффективных кинетических параметров изученной реакции от конверсии

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-10122.*

**Литература**

1. Kolb H.C., Sharpless K.B. The growing impact of click chemistry on drug discovery // Drug Discovery Today. 2003. Vol. 8. P. 1128-1137.

2. Ma M. et al. High impact polytriazole resins for advanced composites // Designed Monomers and Polymers. 2020. Vol. 23. P. 50-58.

3. Huisgen R. Kinetics and mechanism of 1,3-dipolar cycloadditions // Angew. Chem. Int. Ed. 1963. Vol. 2. P. 633-645.