

A von Pechmann reakció mechanizmusának vizsgálata elméleti kémiai módszerekkel

Daru János MSc II. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Stirling András** tudományos tanácsadó
MTA Kémiai Kutatóközpont, elméleti kémiai osztály

A kumarin vázas vegyületek előállításának egyik elterjedt módszere, a Hans von Pechmann¹ által kifejlesztet kondenzációs reakció.

A reakció mechanizmusa az 1884-es felfedezése ellenére mind a mai napig vitatott kérdés². Kutatásunk során megkíséreltünk két potenciális reakció utat összehasonlítani elméleti kémiai módszerek segítségével, valamint választ adni arra a kérdésre, hogy vannak-e a reakció úton stabil, spektroszkópiák segítségével kimutatható intermedierek.

Számításainkat G03 programcsomaggal végeztük, a gázfázisban, merev-rotátor, harmonikus-oszcillátor, ideális-gáz közelítésben, és figyelembe vettük az oldószer effektust polarizálható-kontinuum modell alkalmazásával.

[1] v. Pechmann, H.; Duisberg, C., *Ber. Dtsch. Chem. Ges.*, 2119 (16), (1883)

[2] Calvino-Casilda V., Banaresa M.A., LozanoDizb E., *Catalysis Today* 155 (3-4) 279–281(2010)