

### III-P-2.20

## NGHIÊN CỨU PHỔ HỒNG NGOẠI CỦA PHẢN ỨNG GIỮA DẪN XUẤT PYRIDIN VỚI IOD TRÊN NỀN POLYETYLEN

*Nguyễn Thu Hương<sup>1</sup>, Nguyễn Thị Thanh Mai<sup>1</sup>, Jens Spanget-Larsen<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Khoa Hóa học, Trường ĐH Khoa học Tự nhiên - ĐHQG Tp. HCM

<sup>2</sup>Khoa Khoa học Hệ thống và Mô hình, Trường ĐH Roskilde, Đan Mạch

### Tóm tắt

Phản ứng của từng chất 4-methylpyridin, 4-tert-butylpyridin với iod được nghiên cứu bằng phổ hồng ngoại. Hai dạng nền mẫu không phân cực sử dụng cho nghiên cứu là dung môi lỏng (CS<sub>2</sub>, CCl<sub>4</sub>) và “dung môi rắn” polyetylen mật độ thấp. Khác với các trường hợp trong nền dung môi lỏng, sản phẩm chính của phản ứng giữa dẫn xuất pyridin với iod trên nền polyme kéo căng là các hợp chất ion. Các lỗ trống trong cấu trúc polyme kéo căng, được cho là tác nhân xúc tác cho phản ứng hình thành poly-iod, nhờ đó làm tăng hiệu suất phản ứng tạo dạng sản phẩm ion. Kết quả nghiên cứu phổ hồng ngoại đã cung cấp những bằng chứng về sự hiện diện của sản phẩm bis(4-tert-butylpyridinium) iodua polyiodua. Các tính toán lý thuyết sử dụng hàm mật độ B3LYP/DGDZVP cho kết quả phù hợp với cấu trúc đề nghị. Trường hợp phản ứng của 4-methylpyridin với iod lại cho thấy cơ chế phản ứng phức tạp, tạo ra nhiều dạng sản phẩm (cation, oligome).

Từ khóa: 4-methylpyridin, 4-tert-butylpyridin, phổ hồng ngoại, polyetylen mật độ thấp.

## FTIR SPECTROSCOPIC STUDIES OF THE REACTION OF AZA-AROMATES WITH IODINE IN POLYETHYLENE MATRIX

*Nguyen Thu Huong<sup>1</sup>, Nguyen Thi Thanh Mai<sup>1</sup>, Jens Spanget-Larsen<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Faculty of Chemistry, University of Science - VNU HCMC

<sup>2</sup>Department of Science, System and Models, Roskilde University, Denmark

### Abstract

The reaction of pyridine, 4-methylpyridine, 4-tert-butylpyridine with iodine have been studied by FTIR spectroscopy. There are two kinds of non polar matrices are liquid solvents (CS<sub>2</sub>, CCl<sub>4</sub>) and “solid solvent” (stretched low-density polyethylene). Unlike the case of liquid solutions, the main product of aza-aromatic-iodine-system in stretched low-density polyethylene is ionic products. The reaction cavities in the stretched polymer catalyze the formation of polyiodine chains, increasing the yield of the ionic reaction. There are reasonable evidences from IR data for bis(4-tert-butylpyridinium) iodide polyiodide present. This structure has never been observed before. Theoretical calculations at B3LYP/DGDZVP level is in good agreement with the proposed structure. Investigations for case of reaction between 4-methylpyridine and iodine indicates a complicated reaction mechanism, leading to a variety of possible products (cations, oligomers).

Key words: 4-methylpyridine, 4-tert-butylpyridine, FTIR studies, low-density polyethylene