

Тематическое направление: Кинетика и механизм реакций ацильного переноса. Часть 8.

Влияние состава растворителя “вода – 2-пропанол” на кинетику реакций алифатических аминов с 4-нитрофенилбензоатом

© Кочетова¹ Людмила Борисовна, Калинина² Наталья Владимировна,
Курицын² Лев Викторович и Кустова^{1*+†} Татьяна Петровна

¹ Кафедра органической и физической химии. Ивановский государственный университет.
Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: kustova_t@mail.ru

² Кафедра неорганической и аналитической химии. Ивановский государственный университет.
Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03.

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ацилирование, диэтиламин, дибутиламин, 4-нитрофенилбензоат, вода – 2-пропанол, специфическая сольватация, квантово-химическое моделирование.

Аннотация

Исследовано влияние состава бинарной системы “вода – 2-пропанол” на кинетику реакций диэтиламина и дибутиламина с 4-нитрофенилбензоатом. Получены уравнения, связывающие константы скорости реакций с составом бинарного растворителя. Обнаружен компенсационный эффект. Проведено квантово-химическое моделирование Н-комплексов дибутиламина и диэтиламина с компонентами растворителя. Кинетические данные сопоставлены с орбитальными характеристиками сольватных комплексов.