

Тематическое направление: Кинетика и механизм реакций ацильного переноса. Часть 9.

Влияние строения сложных эфиров на кинетику N-ацилирования пиперидина и морфолина в водно-органических растворителях

© 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, пиперидин, морфолин, фенилбензоаты, вода–1,4-диоксан, вода–2-пропанол, квантово-химические дескрипторы.

Аннотация

Исследована кинетика реакций пиперидина и морфолина с моно- и динитрозамещенными в феноксидном фрагменте фенилбензоатами в бинарных растворителях вода–2-пропанол и вода–1,4-диоксан. Показано, что для соединений этого класса справедливо уравнение Гаммета. Установлена линейность между логарифмами констант скорости реакций и pK_a уходящих групп эфиров. Обнаружена линейность между логарифмами констант скорости реакций аминов с 4-нитрофенилбензоатом и с фенилсалицилатом. Значения активационных параметров реакций пиперидина со сложными эфирами согласуются с результатами исследований температурной зависимости реакций дибутиламина и диэтиламина с 4-НФБ в аналогичных условиях. Показано, что величины $E_{НСМО}$ замещенных фенилбензоатов могут служить дескрипторами их реакционной способности при взаимодействии с пиперидином.