

Жидкофазное гидрогенизационное аминирование алифатических альдегидов нитрофенолами на палладиевом катализаторе

© Магдалинова⁺ Наталья Александровна, Сябетова Кристина Казиевна,
Клюев* Михаил Васильевич

Кафедра фундаментальной и прикладной химии. Ивановский государственный университет,
ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Ивановская область. Россия. Тел.: +7 (4932) 37-37-03.

E-mail: mn2408@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: палладийсодержащий катализатор, жидкофазное гидрогенизационное аминирование, пропаналь, 2-метилпропаналь, нитрофенолы, квантово-химическое моделирование.

Аннотация

В работе представлены результаты исследования палладийсодержащего катализатора, полученного на основе активированного угля марки РНО М200 (1% Pd/C). В модельных реакциях жидкофазного гидрирования изомерных нитрофенолов и гидрогенизационного аминирования пропаналя и 2-метилпропаналя 2-нитрофенолом, 3-нитрофенолом и 4-нитрофенолом в мягких условиях ($T = 298-318$ К, $P_{H_2} = 1$ атм, растворитель – этанол) проведено тестирование полученного палладийсодержащего катализатора. Показано, что продуктами гидрогенизационного аминирования альдегидов являются соответствующие вторичные жирноароматические амины 2-(*N*-пропиламино)фенол, 2-(*N*-2-метилпропиламино)фенол, 3-(*N*-пропиламино)фенол, 3-(*N*-2-метилпропиламино)фенол, 4-(*N*-пропиламино)фенол, 4-(*N*-2-метилпропиламино)фенол. По скорости гидрирования активность 1% Pd/C возрастает в ряду: 3-нитрофенол < 4-нитрофенол < 2-нитрофенол из-за электронных эффектов гидроксильной группы. Гидрирование изомерных нитрофенолов протекает быстрее, чем гидроаминирование альдегидов полученными аминофенолами. При совмещении реакций целевые вторичные амины получались быстрее, чем при последовательном проведении этих реакций, а константа скорости гидроаминирования пропаналя 2-нитрофенолом и 4-нитрофенолом была выше по сравнению с константой скорости гидрирования соответствующих нитрофенолов и с константой скорости гидроаминирования альдегида полученными аминофенолами. С применением квантово-химического моделирования молекул исследуемых соединений в среде этанола получены их структурные характеристики. С помощью NBO-анализа (DFT/B3LYP/cc-pVTZ) вычислена энергия внутримолекулярной водородной связи в молекуле 2-нитрофенола. Результаты квантово-химического моделирования согласуются с экспериментальными данными.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Магдалинова Н.А., Сябетова К.К., Клюев М.В. Жидкофазное гидрогенизационное аминирование алифатических альдегидов нитрофенолами на палладиевом катализаторе. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.79. №8. С.36-42. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-8-36

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Магдалинова Н.А., Сябетова К.К., Клюев М.В. Жидкофазное гидрогенизационное аминирование алифатических альдегидов нитрофенолами на палладиевом катализаторе. *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.8. №3. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-8-36/ROI-jbc-RA/24-8-3-12

The output for citing the English online version of the article:

Natalia A. Magdalinova, Kristina K. Syabetova, Mikhail V. Klyuev. Liquid-phase reductive amination of aliphatic aldehydes with nitrophenols on a palladium catalyst. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.8. No.3. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-8-36/ROI-jbc-A/24-8-3-12