

По результатам обработки хроматограмм удалось рассчитывать степень накопления акридон-2-сульфоновой кислоты и построить кинетические кривые расходования акридона.

На основе построенных кинетических кривых удалось рассчитать константы скорости расходования акридона в реакции сульфирования, представленные в табл.

Таблица 1 – Кинетические параметры реакций сульфирования акридона в концентрированной серной кислоте

Температурный режим, °С	Время процесса, мин	Константа скорости, $k, \times 10^{-6} \text{ c}^{-1}$	
		Традиционный способ нагрева	МВИ
140	240	111,2	115,9
150	80	234,9	381,7
160	30	388,8	680,3

Из полученных результатов видно, что реакции сульфирования акридона, проводимые в условия МВИ, протекают с большей скоростью, возможно, в следствие появления в реакционной смеси большего числа эффективных соударений реагирующих молекул.

1. Маркович Ю.Д., Пелевин Н.А., Кудрявцева Т.Н., Лоторев Д.С., Ахматдинов Р.Р. Кинетические характеристики реакции сульфирования акридона и 2-метилакридона // Известия КурскГТУ.- № 2.-2008.- С. 42-45.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

Шафиков М.З., Ельцов О.С., Бельская Н.П.

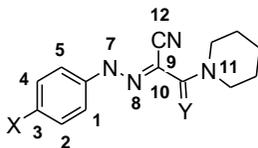
Уральский государственный технический университет – УПИ

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Shafikoff@gmail.com

В настоящее время квантово-химические расчеты позволяют химикам изучать и предсказывать реакционную способность веществ, не прибегая при этом к реальному проведению химических экспериментов.

Для изучения изменения нуклеофильности в ряде однотипных соединений, в которых варьируются электронные свойства заместителей, нами были проведена серия квантово-химических расчетов зарядов и энергий ВЗМО арилгидразонов, содержащих карбоксамидную, тиоамидную и амидиновую группы с помощью методов MP2 и DFT.



X = OMe, H, NO₂; Y = O, NH, S

Рассчитанные величины зарядов атомов показали, что для атомов, лежащих в непосредственной близости к заместителю С6 и С10, изменение заряда носит характер прямой зависимости от типа заместителя. При переходе от электроноакцепторных заместителей к электронодонорным положительные заряды уменьшаются, а отрицательные увеличиваются. Напротив, для атомов, локализованных в центральной части молекулы, отдаленной от варьируемых заместителей, при переходе от электроноакцепторных заместителей к электронодонорным происходит увеличение положительных зарядов и уменьшение отрицательных. Это говорит о том, что нуклеофильные свойства молекулы связанные с этими атомами имеют обратную зависимость от типа заместителя. Объяснение полученной зависимости зарядов на атомах N7 и N8 от природы заместителей X и Y было получено при визуализации ВЗМО. Так оказалось, что присутствие в молекуле электронодонорных заместителей приводит к увеличению электронной плотности периферийных атомов, что, соответственно, увеличивает нуклеофильные свойства обусловленные атомами, лежащими близко к такому заместителю. Введение электроноакцепторных заместителей приводит к противоположному эффекту: к повышению электронной плотности ВЗМО в центральной области молекулы.

Таким образом, полученные результаты квантово-химических расчетов, согласуются с теоретическими представлениями, поскольку введение электроноакцепторных заместителей снижает энергию ВЗМО, что вызывает снижение нуклеофильности молекулы в целом, хотя и увеличивает нуклеофильность центральных атомов по сравнению с периферийными.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что для исследуемых соединений возможно изменение направления электрофильной атаки при изменении природы заместителей от электронодонорных до электроноакцепторных. Следует отметить, что в целом при этом должна измениться и скорость соответствующей реакции с электрофилами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта 10-03-96084-р_урал_a