

РЕАКЦІЇ ВІДРИВУ Н-АТОМА ФТАЛІМІД-*N*-ОКСИЛЬНИМИ РАДИКАЛАМИ ВІД С-Н ЗВ'ЯЗКІВ ТРИНІТРОТОЛУОЛУ

*Сіробаба С. І.*¹, Сергеева Ю. Ю.³, Гордеева І. О.^{1,2}, Куш О. В.^{1,2}, Компанець М. О.², Шендрик О. М.¹

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Київ, Україна

³Вінницький науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України, Вінниця, Україна

s.sirobaba@donnu.edu.ua

Тротил (2,4,6-тринітротолуол) є вибуховою речовиною, що використовується у військових набоях різного типу. З початку широкомасштабного вторгнення Росії в Україну, у результаті інтенсивних обстрілів, тротил потрапляє у ґрунт і водойми, що призводить до забруднення величезних територій і завдає значної шкоди всім живим організмам. Тротил є дуже токсичною і стабільною до розпаду сполукою через наявність трьох нітрогруп у складі молекули. Деградація тротилу є пріоритетною і складною задачею.

Використання *N*-гідроксимідів як каталізаторів окислення органічних сполук є перспективним для селективної оксофункціоналізації та оксидативної деградації широкого кола сполук, у тому числі екополлютантів. У роботі досліджено *N*-гідроксифталімід (NHPI) та його похідні з електрондонорними і електроакцепторними замісниками в бензольному кільці (4-метокси-*N*-гідроксифталімід (4-MeO-NHPI), 3-хлор-*N*-гідроксифталімід (3-Cl-NHPI), 3,4,5,6-тетрахлор-*N*-гідроксифталімід (Cl₄-NHPI)).

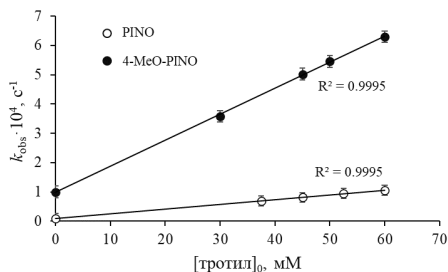


Рис. Залежність спостережуваних констант швидкості від концентрації тротилу

Для реакцій окислення з використанням каталізаторів *N*-гідроксимідів ключовою стадією є відрив атома Гідрогену (HAT) від аліфатичних С-Н зв'язків субстрату *N*-оксильними радикалами (PINO). У представленому дослідженні вивчали кінетику HAT реакцій PINO та його похідних з метою встановлення впливу структури каталізатору на швидкість HAT реакції з тротилом, використовуючи спектрофотометричний метод дослідження. Активною формою каталізатору є відповідні *N*-оксильні радикали, які були генеровані шляхом окислення NHPI або його похідних фенілйоддіацетатом (PhI(OAc)₂) в ацетонітрилі за температури 30 °С. При додаванні окисника до розчину NHPI в УФ-спектрі спостерігається поява нової смуги поглинання з максимумами 382 нм, 491 нм, 378 нм та 406 нм відповідно для NHPI, 4-MeO-NHPI, 3-Cl-NHPI та Cl₄-NHPI. Встановлено, що PINO з електроноакцепторними замісниками не взаємодіють з тротилом, тому у подальших дослідженнях використовували структури з електрондонорними замісниками. Із залежностей спостережуваних констант швидкості першого порядку від початкової концентрації тротилу у системі розраховано величини констант швидкості реакції відриву Н-атому (k_H) PINO та 4-MeO-PINO від С-Н зв'язків метильної групи тротилу. Вони дорівнюють 1,88 · 10⁻³ та 8,93 · 10⁻³ л/(моль · с) для PINO та 4-MeO-PINO відповідно.