

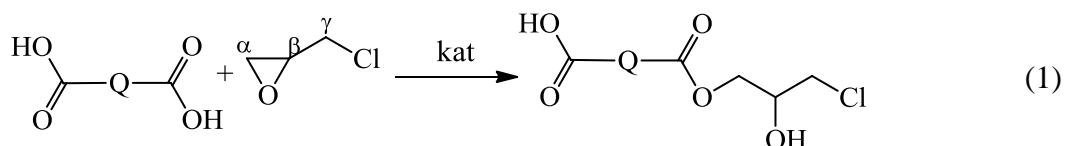
## МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ ПРОПАНДІОВОЇ КИСЛОТИ ЯК НУКЛЕОФІЛЬНОГО РЕАГЕНТА В РЕАКЦІЇ З ХЛОРМЕТИЛОКСИРАНОМ

Калінський О. М., Завидовський О. І., Швед О. М., Беспалько Ю. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса

o.kalinskiy@donnu.edu.ua

Оксиран та його похідні характеризуються надзвичайно високою реакційною здатністю. Реакція оксиранів з гідроксилвмісними реагентами використовується в синтезі лікарських препаратів, епоксидних сполук, функціональних полімерних матеріалів, які мають високі експлуатаційні показники та застосовуються як пластифікатори, герметики, гідроізолятори, клеї у електроніці. Особливе значення має реакція хлорметилоксирану (епіхлоргідрин – ЕХГ) з карбоновими кислотами (протоновмісні нуклеофільні реагенти), що, крім широкого практичного застосування, є модельною для вивчення механізму нуклеофільного розкриття оксиранового циклу. Перспективним напрямком дослідження є вивчення ацидолізу ЕХГ полікарбоновими кислотами, продукти взаємодії якого є основою полімерних матеріалів з флексібілізуючими властивостями:



Метою роботи є моделювання поведінки двохосновної карбонової кислоти в реакції (1). Об'єктами дослідження є протоновмісні нуклеофільні реагенти: пропандіова кислота, її метиловий естер та оксиран: хлорметилоксиран. Методами квантової хімії знайдено рівноважні конфігурації перехідних станів (ПС) на шляху реакції (1). Оптимізацію ПС і розрахунок частот коливального спектру проведено методом DFT у наближенні B3LYP/6-31+G\*\* для вакууму. Розрахунки здійснено у програмному комплексі PC FIREFLY 7.1.G. Належність локалізованих ПС відповідній реакції доведена спусками за процедурою IRC у долини реактантів і продуктів. Знайдено рівноважні конфігурації ПС аніонів пропандіової кислоти (**a**) та її метилового естеру (**б**) з ЕХГ у випадку тилової атаки на  $\alpha$ -атом Карбону (рис. 1).

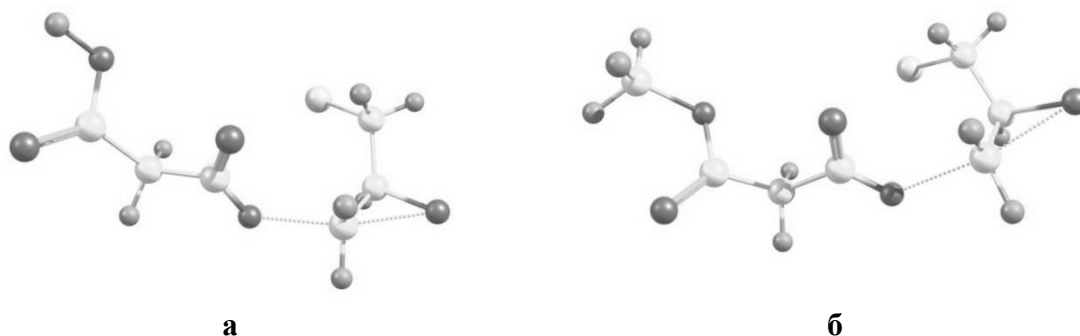


Рис. 1. ПС з аніонів пропандіової кислоти (**a**) та її метилового естеру(**б**) з ЕХГ

Розраховано геометричні та активаційні параметри ПС (**a**) та (**б**). Встановлено, що енергія активації у випадку ПС з аніоном метилового естеру пропандіової кислоти менша, ніж у випадку ПС з аніоном пропандіової кислоти. Це дозволяє припустити, що стадія естерифікації другої карбоксильної групи відбувається швидше, ніж першої. Одержані результати надають можливість прогнозування кінетичних особливостей розкриття оксиранового циклу ЕХГ двохосновними карбоновими кислотами та їх естерами.