

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАРШРУТА
РЕАКЦИИ ЦИКЛОГЕКСИЛАМИНА С ФЕНИЛОВЫМ ЭФИРОМ
БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ РАСТВОРИТЕЛЯ**

Л. Б. Кочетова, Н.В. Калинина, Т. П. Кустова

Ивановский государственный университет

С целью установления маршрута аминолиза фенилового эфира бензойной кислоты циклогексиламином (ЦГА) в среде растворителя проведено квантово-химическое моделирование поверхности потенциальной энергии (ППЭ) реакции ЦГА, окруженного 1-2 молекулами модельного растворителя – воды, с фениловым эфиром бензойной кислоты, и этой же реакции в газовой фазе. Расчеты проводились с использованием программного пакета HyperChem 7.52[®]. В качестве координат реакции использовали расстояние между взаимодействующими молекулами и угол атаки нуклеофила (амин) на карбоксильную группу эфира. Молекулы воды размещали вокруг аминогруппы таким образом, чтоб они образовывали с аминогруппой водородные связи и выступали в них в качестве Н-акцепторов.

Полученные ППЭ имеют единственную седловую точку, соответствующую переходному состоянию (ПС) реакции и единственный минимум. Угол атаки молекулы нуклеофила изменяется по мере её приближения к молекуле эфира от фронтального до близкого к аксиальному. Реакции идут в одну стадию, разрыв связи С-О эфира и образование связи С-N продукта происходят почти одновременно, что указывает на протекание процессов по S_N2 пути. Сумма порядков связей R_{C-N} и R_{C-O} больше единицы во всех ПС, что соответствует «сжатому» ПС.

Проведено моделирование структур активированных комплексов реакций. Установлено, что с геометрической точки зрения реакционный центр в ПС представляет собой искаженный тетраэдр. Произведена оценка энергии активации реакций. Обнаружено её уменьшение при переходе от газофазной реакции к процессу, протекающему в водном растворе.

Для исследования влияния специфической сольватации на реакционную способность ЦГА в аминолизе, проведено квантово-химическое моделирование структуры сольватоккомплексов ЦГА с компонентами растворителей, вода-пропанол-2 и вода-диоксан в супермолекулярном приближении.