

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПУТИ РЕАКЦИИ  
АММИАКА С ФЕНИЛОВЫМИ ЭФИРАМИ БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ С  
УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ РАСТВОРИТЕЛЯ**

**Л. Б. Кочетова, Н.В. Калинина, Т. П. Кустова, Н. Р. Ишкулова**

*Ивановский государственный университет*

С целью исследования влияния растворителя на механизм ацилирования аммиака, проведено компьютерное моделирование поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) реакции аммиака с феноловым (I) и 3-нитрофеноловым (II) эфирами бензойной кислоты в газовой фазе, а также реакции аммиака с эфиром (II) в присутствии молекул растворителя: 1 и 2 молекулы воды, молекулы воды и молекулы диоксана, молекулы воды и молекулы 2-пропанола. Расчеты проводились с помощью программного пакета HyperChem 7.52<sup>®</sup>. Полученные ППЭ однотипны, имеют единственную седловую точку, соответствующую переходному состоянию (ПС) реакции. Направление атаки нуклеофила изменяется по мере его приближения к карбоксильной группе эфира от фронтального до близкого к аксиальному. Все реакции протекают в одну стадию по S<sub>N</sub>2 механизму. Проведен расчет ПС реакций. Найдено, что геометрическая структура ПС представляет собой искаженный тетраэдр.

Произведена оценка энергий активации указанных реакций. Установлено, что она понижается при переходе от газовой фазы к водному раствору, а также при введении в молекулу эфира нитрогруппы. Участие молекулы диоксана в ПС повышает энергию активации по сравнению с ПС реакции в газовой фазе, что указывает на то, что образование ПС, включающего молекулы диоксана, в изучаемой реакции маловероятно. В водном диоксане образуются ПС с участием только молекул воды. В водном изопропанолу важную роль в образовании ПС, наряду с молекулами воды, могут играть молекулы спирта.

Проведено моделирование структуры комплексов аммиака с компонентами водно-органических растворителей, используемых в ацилировании. Показано, что состав комплексов влияет на реакционную способность аммиака и в качестве ее характеристик можно рассматривать вклад и заселенность 2p<sub>z</sub>-орбитали атома азота в ВЗМО.