

ЭПР-СПЕКТРОСКОПИЯ КИНЕТИКИ ПРОТОЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ АМИНОВ, АМИДОВ, ИМИНОВ, ИМИДОВ И ГУАНИДИНОВ

С. Н. Никольский, А. А. Тур, А. С. Масалимов

*Карагандинский государственный университет имени Е. А. Букетова,
Республика Казахстан*

ЭПР-спектроскопических исследования протолитических свойств амидов, карбаматов и уретанов показывают, что они обладают уникальными протолитическими свойствами. Для установления всех электронных факторов, влияющих на специфическую основность азотсодержащих протоноакцепторов, нами был проведен квантово-химический анализ протоноакцепторных свойств простейшего имина и некоторых простейших оснований: аммиака, метиламина, енамина, а также формамида с помощью пакета «GAUSSIAN-2003» с использованием полуэмпирического метода UHF PM3. В таблице представлены рассчитанные величины сродства к протону (СП) и потенциалов ионизации (ПИ) для имина и других родственных протоноакцепторов.

Таблица

Основание	СП, ккал/моль	ПИ, ккал/моль
Енамин	199,09	-177,83
Аммиак	197,11	-203,13
Метиламин	195,07	-209,85
Имин	189,33	-208,43
Формамид	179,13	-214,49

Из приведенных данных, видно, что имин, как и формамид обладает меньшей величиной сродства к протону по сравнению с аммиком и аминами. Можно отметить также факт возрастания величин сродства к протону

указанных азотистых оснований по мере уменьшения значений их потенциалов ионизации. Исключение составляет имин. Следует также отметить, что расчетные величины ПИ и СП исследованных изолированных молекул органических оснований не выдерживают строгой физико-химической корреляции с экспериментальными значениями их констант ионизации pK_a , так как последние отражают суммарное влияние водной среды на процесс титрования указанных азотцентрированных протоноакцепторов.