

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 547.587.11: 544.431.24. Поступила в редакцию 20 апреля 2012 г.

Синтез, кинетика и механизм реакции алкилирования салицилата калия аллилбромидом

© Брель Анатолий Кузьмич,^{1*} Лисина Светлана Викторовна,¹
Василькова Елена Алексеевна,¹⁺ Литинский Аркадий Овсеевич²
и Камнев Виталий Владимирович²

¹ Кафедра химии. Волгоградский государственный медицинский университет.

пл. Павших борцов, 1. Волгоград, 400131. Россия. Тел.: (8442) 38-43-13. E-mail: VasilkovaEA@gmail.com

² Кафедра физики. Волгоградский государственный технический университет.

пр. Ленина, 28. Волгоград, 400131. Россия. Тел.: (8442) 24-81-07.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: салициловая кислота (салицилаты), алкилирование, квантово-химические расчеты, нуклеофильное замещение.

Аннотация

Изучена кинетика алкилирования салицилата калия аллилбромидом. Применение схемы на основе теории функционала плотности B3LYP/LanL2DZ с полной оптимизацией геометрии молекул позволило установить, что протекание реакции, как в газовой фазе, так и в растворителе более предпочтительно по S_N2 -механизму.