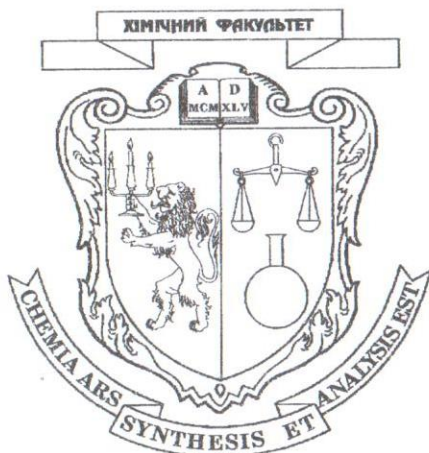


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА  
*хімічний факультет*

НАУКОВЕ ТОВАРИСТВО ШЕВЧЕНКА  
*хімічна комісія*



Присвячується 75 річчю від дня народження  
**професора Оксани Іванівни Бодак**

*ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ*

**XVI НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ  
«ЛЬВІВСЬКІ ХІМІЧНІ ЧИТАННЯ – 2017»**

28-31 травня 2017 року

ЛЬВІВ – 2017

**РЕАКЦІЙНА ЗДАТНІСТЬ АЦЕТАТ-АНІОНА У РЕАКЦІЇ  
РОЗКРИТТЯ ОКСИРАНОВОГО ЦИКЛУ**

**К.С. Ютілова, Ю.М. Беспалько, О.М. Швед**

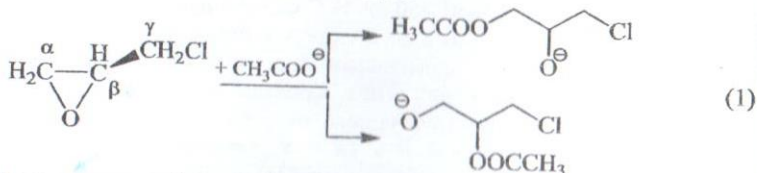
*Кафедра органічної хімії,*

*Донецький національний університет імені Василя Стуса,  
вул. 600-річчя, 21, 21021 Вінниця, Україна*

*e-mail: k.iutilova@donnu.edu.ua*

Завдання встановлення достовірного механізму взаємодії нуклеофіла з оксираном потребує комплексного підходу, що передбачає дослідження як інструментальними, так і квантово-хімічними методами.

Взаємодію епіхлоргідрину (1-хлор-2,3-епоксипропан, ЕХГ) з ацетат-аніоном обрано як модельну реакцію (1). Оптимізацію перехідних станів 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.



Атака ацетат-аніона відбувається за  $\alpha$ - і  $\beta$ -Карбонами оксиранового циклу у фронтальному або тиловому напрямку відносно Оксигену оксиранового циклу (рис. 1). Оксиген ацетат-аніону, що не приймає участі в реакції, при цьому може знаходитись по один бік площини циклу з хлорметильною групою (а) або по різні боки (б).

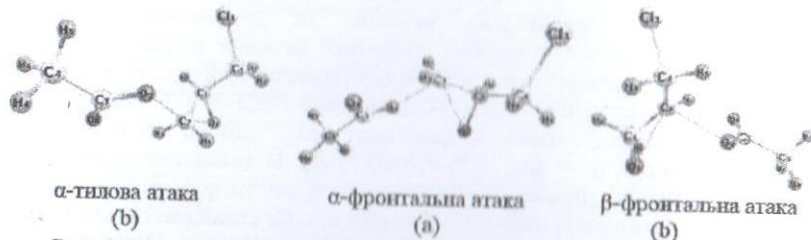


Рис. 1. Можливі напрямки атаки ацетат-аніона на молекулу ЕХГ

Встановлено, що найбільш доступним для нуклеофільної атаки є  $\alpha$ -тиловий напрямок, що узгоджується з правилом Красуського. Атака за  $\beta$ -Карбоном значно ускладнена електростатичним та стеричним впливом хлорметильної групи. Цей вплив найсильніше проявляється у випадку  $\beta$ -фронтальної атаки типу (а), для якої неможливо отримати стабільну структуру продукту реакції.

Труба А.	Н38	Черній М.	Ф36
Тульський Г.	Т4, Т13	Черних І.	Ф40
Тунь Є.	Т20	Чертихіна Ю.	У53
Тупис А.	П11, У42	Четвержук Я.	Ф21
Тупичак М.	О29	Чигвінцева О.	М1
Уманець А.	У32	Чигин Н.	А23
Фалалєєва Т.	О20	Чижмар Е.	Н29
Фальченко З.	О21	Чонка Я.	Н24
Федєвич Є.	Ф13	Чумак Н.	А15
Федєвич О.	Т12, Ф13	Чундак С.	Н54
Федина Л.	Н35	Чуприна К.	Т8
Федина М.	Н35	Шаповал П.	У37
Федишин О.	У42	Швед О.	У21, У46
Федорчук А.Ф.	Н4, Н27, Н35	Шевченко В.	Т20
Федорчук А.А.	Н23	Шевченко М.	О14
Федько А.	Н14	Шевченко О.	Ф6, Ф7
Федько Н.	О14	Шевчак Л.	Д6
Фесенко О.	У32	Шегедин М.	П7
Філіпенко Н.	Н48	Шелігацька О.	О34
Філоненко М.	У6	Шендрик О.	Ф15
Філоненко С.	У26	Шнійка О.	О29
Фокін В.	У56	Шишкіна С.	У4, Н36
Фочук П.	Т20	Шклярська М.	Т17
Фролов Д.	О24	Шпирка З.	Н37
Хавунок О.	Ф3	Шпирка І.	Т22
Халавка Ю.	М2, М18	Штеменко О.	У9, Н5, Н9
Хаміцевич С.	А1	Штендер В.	У13, Н30
Харів М.	М4	Штомпель О.	О5
Харлова М.	Н9	Шумейко О.	Ф4
Харченко К.	М16	Шурко С.	Ф27
Хвальбота Л.	У36	Шута Г.	Н33
Хмарська Л.	Д2	Щербакова Т.	А16
Хома Р.	У35	Щербина О.	О6
Хомницька Я.	А11	Щукіна Л.	У22
Христенко І.	А27	Юзьвін І.	Н7
Христич О.	У56	Юркевич М.	А23
Хрущук Х.	М21	Ютілова К.	У46
Циганкова В.	О5	Ягольник С.	Н21
Ціко У.	У49	Яїцький С.	У54
Цьонь Н.	Д3	Якимович А.	Ф3
Чайка М.	Н13	Яремко З.	П9, М17, Ф8, Ф11
Чайківська Р.	У37, Т14	Ятчишин Й.	У37
Чебаненко О.	У4	Яцишин М.	У34, У49, Ф30, Ф31, Ф41
Чеботарьов О.	А11, А12, А13, А14, А15, А16, А17, А18, А19, А21	Яцков М.	У2
Червінська Н.	Ф28		
Чередніченко А.	О8		
Черненко В.	У28		