CZWARTORZĘDOWE SOLE 1,4-DIAZABICYKLO[2.2.2]OKTANU. SYNTEZA, STRUKTURA, SPEKTROSKOPIA

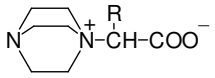
Zofia DEGA-SZAFRAN,[a] Piotr BARCZYŃSKI,[a] Andrzej KATRUSIAK,[a] Mirosław SZAFRAN,[a] Waldemar PERDOCH[b]

[a]) Wydział Chemii, Uniwersytet A. Mickiewicza, Poznań
[b]) Wydział Technologii Drewna, Uniwersytet Przyrodniczy, Poznań
e-mail: degasz@amu.edu.pl

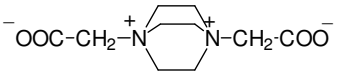
1,4-Diazabicyklo[2.2.2]oktan (DABCO) jest kulistą molekułą, w której dwa atomy azotu są połączone trzema mostkami etylenowymi. Jest to silna zasada o dwóch stałych dysocjacji, $pK_1 = 8{,}79$, $pK_2 = 2{,}70$ [1,2].

Alkilowanie I-rz halogenkami alkilowymi daje N,N'-dialkilo pochodne, natomiast w reakcji z II-rz halogenkami alkilowymi powstają N-alkilo pochodne DABCO [3].

W reakcji DABCO z estrami etylowymi kwasów 2-halogenoalkanokarboksylowych, a następnie ich hydrolizie połączonej z dehydrohalogenacją otrzymano mono- (**1**) i di- (**2**) betainy DABCO [4,5].



1 R = H, CH_3, C_2H_5, C_3H_7, C_4H_9



2

Struktury wybranych betain i ich halogenowodorków, oraz kompleksu dibetainy DABCO (**2**) z kwasem 4-hydroksybenzoesowym określono pomiarami rentgenograficznymi. Zmierzono ich widma w podczerwieni i magnetycznym rezonansie jądrowym. Wyznaczono wartości pk_a betain (**1**) i (**2**) za pomocą miareczkowania potencjometrycznego.

Literatura

[1] Staley R.H., Beauchamp J.L.: *J. Am. Chem. Soc.*, 1974, **96**, 1604.
[2] Barczyński P., Dega-Szafran Z., Katrusiak A., Perdoch W., Szafran M.: *J. Mol. Struct.,* 2009, **938**, 283.
[3] Oae S., Hovarth B., Zalut C., Harris R.: *J. Org. Chem.,* 1959, **24**, 1344.
[4] Barczyński P., Dega-Szafran Z., Katrusiak A., Perdoch W., Szafran M.: *J. Mol. Struct.,* 2009, **933**, 46.
[5] Wu D.-D., Mak T.C.W.: *J. Chem. Crystallogr.,* 1997, **27**, 11.