

Таблица 2. Гидроэтоксикарбонилирование изобутилена в присутствии системы Pd(Асac)₂-PPh₃-TsOH. Количество Pd(Асac)₂ = 0.035 г (0.115 ммоль). Мольное отношение изобутилен : Pd(Асac)₂ = 550

№	Мольное отношение реагентов и компонентов каталитической системы к Pd(Асac) ₂			Условия проведения реакции			Выход этилизовалерата %
	этанол	PPh ₃	TsOH	T, °C	p _{со} , МПа	τ, ч	
1	435	7	12	100	2.0	6	68.0
2	435	5	12	100	2.0	6	72.0
3	435	4	12	100	2.0	6	73.5
4	435	3	12	100	2.0	6	74.5
5	435	2	12	100	2.0	6	46.0
6	435	9	12	100	2.0	6	66.0
7	435	3	13	100	2.0	6	63.0
8	435	3	10	100	2.0	6	71.0
9	435	3	8	100	2.0	6	64.0
10	435	3	12	110	2.0	6	58.0
11	435	3	12	90	2.0	6	60.0
12	435	3	12	100	1.5	6	52.0
13	435	3	12	100	2.2	6	75.0
14	435	3	12	100	2.5	6	76.0
15	435	3	12	100	2.8	6	77.0
16	435	3	12	100	3.0	6	78.0
17	435	3	12	100	3.2	6	68.0
18	435	3	12	100	3.5	6	37.0
19	435	3	12	100	3.0	4	77.0
20	275	3	12	100	3.0	5	79.0
21	435	3	12	100	3.0	5	79.0
22	550	3	12	100	3.0	5	64.0
23	1100	3	12	100	3.0	5	25.4

оказалось [Pd(Асac)₂] : [PPh₃] : [TsOH] = 1 : 7 : 12. Такое влияние увеличения избытка в системе трифенилфосфина и *n*-толуолсульфокислоты на выход продукта, по-видимому, объясняется их стабилизирующим действием на катализатор. Большое влияние на выход продукта оказывают также температура, давление монооксида углерода и продолжительность реакции. При увеличении температуры проведения реакции от 90 до 100°C выход продукта повышается с 54.8 до 67.6% (табл. 1, пп. 4 и 9). При дальнейшем повышении температуры (табл. 1, п. 10) вследствие дезактивации катализатора (появление палладиевой черни) наблюдается снижение выхода. Зависимости выхода продукта от давления монооксида углерода и продолжительности реакции также имеют экстремальный характер: оптимальными являются давление монооксида углерода 2.0 МПа (табл. 1, пп. 4, 11 и 12) и продолжительность 4 ч (табл. 1, пп. 4, 13, 14). Дальнейшее увеличение давления монооксида углерода до 2.5 МПа резко снижает выход продукта до 39.7% (табл. 1, п. 12),

что связано, по-видимому, с конкуренцией олефина и монооксида углерода за место в координационной сфере комплексов палладия.

Реакция гидроэтоксикарбонилирования изобутилена монооксидом углерода и этанолом также протекает региоселективно с образованием линейного продукта. Изучено влияние условий проведения данной реакции на выход целевого продукта – этилизовалерата (табл. 2). Оптимальное соотношение компонентов каталитической системы является [Pd(Асac)₂] : [PPh₃] : [TsOH] = 1 : 3 : 12 (табл. 2, пп. 1–9). Следует отметить, что в отличие от гидроэтоксикарбонилирования изобутилена в случае гидроэтоксикарбонилирования изобутилена требуется меньшее количество трифенилфосфина, что, по-видимому, связано в первую очередь с природой спиртового реагента. Зависимости выхода продукта реакции от температуры (табл. 2, пп. 4, 10 и 11) и продолжительности процесса (табл. 2, пп. 16, 19 и 21) имеют экстремальный характер с максимумами при 100°C и 5 ч. Сильное влияние на выход продукта оказывает