# Proc. Estonian Acad. Sci. Chem., 1990, 39, N 3, 187–188 https://doi.org/10.3176/chem.1990.3.12

УДК 547.298.11/16+541.127.3

Sven OIDJÄRV and Arno KUUSK

# AMINOLYSIS OF METHYL ESTER OF TETRADECANOIC ACID WITH N,N-DIMETHYL-1,3-PROPANEDIAMINE

Sven OIDJÄRV, Arno KUUSK. TETRADEKAANHAPPE METÜÜLESTRI AMINOLÜÜS N,N-DIME-TÜÜL-1,3-PROPAANDIAMIINIGA

Свен ОЙДЯРВ, Арно КУУСК. АМИНОЛИЗ МЕТИЛОВОГО ЭФИРА ТЕТРАДЕКАНОВОЙ КИС-ЛОТЫ с N, N-ДИМЕТИЛ-1,3-ПРОПАНДИАМИНОМ

## (Presented by J. Kann)

In literature no kinetic data on the aminolysis of fatty acid esters with N,N-dimethyl-1,3-propanediamine can be found. In [<sup>1</sup>] the synthesis and properties of the aminolysis products of fatty acids  $C_8$ — $C_{16}$  have been described. The kinetics of aminolysis of hexadecanoic acid esters with 2-aminoethanols has been determined in pseudomonomolecular conditions in [<sup>2</sup>].

To prepare intermediates for the synthesis of surfactants and to optimize production parameters we investigated the kinetics of the reaction  $C_{13}H_{27}COOCH_3+H_2NC_3H_6N(CH_3)_2 \rightarrow C_{13}H_{27}CONHC_3H_6N(CH_3)_2+CH_3OH$ at seven different temperatures from 20 °C to 170 °C (±1 °C) and at a mole ratio of 1:1.

Samples were titrated to determine potentiometrically the concentration c of N-acyl-N', N'-dimethyl-1,3-propanediamine with a 0.1014 N HCl solution in a 1:1 mixture of diethylene glycol:propanol. Rate constants of the reactions were found using two approaches: (1) the calculation of k by the known method  $k = (c_o - c_t)/c_oc_t t$  [<sup>3</sup>] where  $c_o$  is the initial concentration ( $\pm 0.0025$  mol/l) and  $c_t$  — the concentration of N', N'-dimethyl-1,3-propanediamines ( $\pm 0.069$  mol/l) at the time moment t (see the Table); and (2) a graphical approach, using a linear regression between 1/c and time.

Differences in the k and k' values are due to inaccuracies in experimental data. So, at temperatures higher than those of boiling point, diamines are partly in the vapour phase.

t, ℃	k	log k	k'	log k'
20	$2.346/\pm 0.017/\times 10^{-5}$	$-4.630/\pm0.004/$	$3.243/\pm 0.026/\times 10^{-5}$	-4.489/±0.004/
120	$0.9.490/\pm 0.243/\times 10^{-4}$ $0.1.590/\pm 0.005/\times 10^{-3}$	$-3.023 \pm 0.011 / -2.798 \pm 0.001 /$	$3.068/\pm0.120/\times10^{-4}$ $1.274/\pm0.004/\times10^{-3}$	$-3.513 \pm 0.020 / -2.895 / \pm 0.002 /$
140 150	$0.4.718 \pm 0.094 \times 10^{-3}$ $0.7.313 \pm 0.234 \times 10^{-3}$	$-2.326/\pm0.008/$ $-2.136/\pm0.014/$	$4.373/\pm 0.039/\times 10^{-3}$ $7.809/\pm 0.078/\times 10^{-3}$	$-2.359 \pm 0.004 / -2.108 \pm 0.005 /$
160 170	$0.01.257/\pm 0.186/\times 10^{-2}$ $0.2.630/\pm 0.289/\times 10^{-2}$	$-1.901/\pm0.060/$ -1.581/±0.046/	$9.204/\pm 0.064/\times 10^{-3}$ $1.778/\pm 0.037/\times 10^{-2}$	$-2.036/\pm0.003/$ -1.750/±0.009/

We calculated the dependence of rate constants on the temperature, as well as the energy of activation, E [<sup>3</sup>]: log  $k=3.511-2358.1 T^{-1} (\pm 2.4\%)$   $E=45.1 (\pm 1.2) \text{ kJ/mol}$ log  $k'=3.243-2296.6 T^{-1} (\pm 1.3\%)$   $E'=43.9 (\pm 0.7) \text{ kJ/mol}$ 

#### REFERENCES

- Muzyczko, T. M., Shore, S., Loboda, I. A. Fatty amidoamine derivatives: N,N-dimethyl--N-/3-alkylamidopropyl/amides and their salts // J. Am. Oil Chem. Soc., 1968, 45, N 11, 720-725.
- 45, N 11, 720—725. 2. Ледовских В. М., Гонсалес Риготти Х. Д., Шаповалова Ю. П. Изучение аминолиза сложных эфиров многоатомных спиртов // Изв. ВУЗов. Хим. и хим. технол., 1986, 29, № 11, 29—34.
- 3. Денисов Е. Кинетика гомогенных химических реакций. М., 1987.

Estonian Academy of Sciences, Institute of Chemistry Received Feb. 22, 1990

## УДК 519.23: 519.654

Алгоритм прямого поиска нелинейной регрессии и его применение для решения некоторых химических задач. Халдна Ю., Юга Р. // Изв. АН Эстонии. Химия, 1990, т. 39, № 3, с. 137—139 (англ.; рез. эст., рус.)

Предложен алгоритм прямого поиска для решения задач нелинейной регрессии. Алгоритм не требует вычисления частных производных. Улучшение оценок происходит одновременно для нескольких параметров, чем достигается более оптимальный путь решения. Приведены примеры использования предложенного алгоритма при решении некоторых химических задач. Рис. 1. Библ. 3 назв.

#### УДК 543.544

Определение низких концентраций фосфат-ионов методом ионной хроматографии. Халдна Ю., Яковлева И. // Изв. АН Эстонии. Химия, 1990, т. 39, № 3, с. 140—143 (рус.; рез. эст., англ.)

Метод ионной хроматографии в двухколоночном варианте применен для определения низких концентраций фосфат-ионов (0,1—1,2 мг  $\operatorname{HPO}_{4}^{2^-/\pi}$ ) в присутствии относительно больших концентраций нитрат- (10 мг  $\operatorname{NO}_{3}^{-/\pi}$ ) и сульфат-ионов (20 мг  $\operatorname{SO}_{4}^{2^-/\pi}$ ). Выяснены факторы, от которых зависит применение предложенной методики. Рис. 2. Табл. 1. Библ. 1 назв.