

Наименование НИР: Синтетические возможности функционализации молекулярных карбо-, гетероароматических систем и углеродных наноструктур в жидкой и твердой фазах.		<p style="text-align: center;">Руководитель</p>  <p style="text-align: center;">Орлов Владимир Юрьевич, профессор, д.х.н.</p>
Заказчик, программа: Министерство образования и науки РФ, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России».		
Номер: П841 от 25.05.2010	Внутренний шифр: 851-г/к	
Сроки выполнения: 2010 - 2012 г.г.	Коды ГРНТИ: 31.25.18, 31.25.19	
Место выполнения: НОЦ «Физическая органическая химия»		

Аннотация НИР:

Цели данного этапа работы - исследование синтетических возможностей нуклеофильного замещения традиционных нуклеофугов и водорода в карбо- и гетероциклических соединениях различной структуры в твердой фазе и на границах раздела фаз, сравнение с гомогенной реализацией процессов в жидкой фазе, исследование синтетических возможностей нитрования в твердой фазе для карбо- и гетероциклических соединений различной структуры, оценка основных и побочных направлений процесса, исследование синтетических возможностей аминирования карбо- и гетероциклических соединений различной структуры в жидкой и твердой фазе – полностью достигнуты.

Результаты. Реализованы процессы нуклеофильного замещения водорода в карбо- и гетероциклических соединениях различной структуры в твердой фазе, проведено сравнение с реализацией процессов в жидкой фазе. Проведены теоретические исследования механизмов нуклеофильного замещения водорода. Изучена роль железосодержащих твердофазных добавок в процессе замещения атомов галогена О-нуклеофилами. Обнаружен эффект ускорения процесса, который предварительно был объяснен следующим образом: оксиды железа выступают в качестве промотора действия депротонирующего агента – карбоната калия. Это может заключаться в ионизирующем воздействии на кристаллическую решетку поташа в местах контакта фаз или за счет противодиффузии ионов калия и железа в приповерхностные слои решетки гематита и поташа соответственно. Предположительно это воздействие приводит к ослаблению связей К-О и Fe-О в кристаллических фазах.

Исследованы синтетические возможности нитрования в твердой фазе для карбо- и гетероциклических соединений различной структуры, проведена оценка основных и побочных направлений процесса. Проведены теоретические исследования возможностей реализации различных механизмов процесса нитрования в зависимости от структуры реагентов и условий.

Исследованы синтетические возможности аминирования карбо- и гетероциклических соединений различной структуры в жидкой и твердой фазе.

Полученные результаты могут составлять теоретическую основу высокоэффективных ресурсосберегающих и экологически безопасных химических технологий, которые вследствие минимизации роли растворителя и агрессивных агентов снижают нагрузку на окружающую среду. Кроме того, открываются новые синтетические возможности, связанные с возможностью реализации целого набора направлений изучаемых реакций, что связано с формированием совершенно другого типа микро- (либо нано-) реактора, в отличие от процессов в жидкой фазе.

Результаты НИР представлены на конференциях: III Междун. конф. «Химия гетероциклических соединений», Москва, 2010., Междун. конференция «Углерод: Конструкционные и функциональные материалы и технологии их производства» Владимир 2010.