

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:

Разработка высокоэффективных ресурсосберегающих и экологически безопасных химических технологий невозможна без новых синтетических подходов, а также без использования адекватных теоретических концепций и моделей химических процессов. Поэтому разработка новых направлений органического синтеза является одной из самых актуальных и востребованных задач. Расширение структурного ряда этих практически ценных продуктов невозможно без разработки эффективных инструментов органического синтеза сложных веществ. При этом в значительной степени химическое многообразие ароматических и гетероароматических структур обеспечивается на стадии функционализации – введения в ароматическое ядро той или иной функциональной группы или гетероатома. Одними из эффективных методов функционализации ароматических систем по широчайшему набору вводимых групп и по их дальнейшему превращению являются процессы ароматического нуклеофильного замещения, том числе и такого нетривиального нуклеофуга как водород, электрофильного замещения, процессы прямого аминирования.

В рамках этапа 2011 года проведено исследование факторов управления направлением нитрования в твердой фазе для карбо- и гетероциклических соединений различной структуры, разработка эффективных методов управления процессом; исследование факторов управления направлением нуклеофильного замещения водорода в твердой и жидкой фазах для карбо- и гетероциклических соединений различной структуры, разработка эффективных методов управления процессом. Показаны основные направления развития управляемости этих процессов.

В последние годы интересным объектом для функционализации стали наноструктуры и, в частности углеродные нанотрубки (УНТ). Ранее были подробно рассмотрены теоретические и экспериментальные подходы к формированию методов эффективной модификации УНТ. Одним из способов тонкой регулировки структуры углеродных нанотрубок (а соответственно и тонкое варьирование свойств) является их модификация: как химическая (создание на поверхности объекта гетероатомных функциональных групп), так и нековалентная, формируемая за счет π - π взаимодействия. На этапе 2011 года предложены эффективные методы формирования ковалентно-связанной органической периферии УНТ, ее влияние на морфологию последних, сделаны предположения о закономерностях этих процессов, факторах реакционной способности исследованных нанообъектов и отдельных элементов их поверхности.

Результаты НИР представлены на конференциях: XIV молодежная конференция по органической химии – Екатеринбург, 2011; International scientific conference “Current Topics in Organic Chemistry” Novosibirsk, 2011; Всероссийская научная конференция с международным участием «Успехи синтеза и комплексообразования» Москва, 2011 и V школа-семинар «Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул» Иваново, 2011.