

| | | |
|---|---------------------------------------|---|
| Наименование НИР: Квантово-химическое и экспериментальное исследование реакционной способности карбанионов и сигма-комплексов в условиях реакции нуклеофильного замещения водорода в нитроароматических системах. | | <p style="text-align: center;">Руководитель</p>  <p style="text-align: center;">Цивов Алексей Владимирович, аспирант</p> |
| Заказчик, программа: Министерство образования и науки РФ, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России». | | |
| Номер: 14.740.11.1185 от 14.06.2011 | Внутренний шифр: 874-г/к | |
| Сроки выполнения: 2011 - 2012 г.г. | Коды ГРНТИ: 31.25.19, 31.25.15 | |
| Место выполнения: НОЦ «Физическая органическая химия» | | |
| <p>Аннотация НИР:</p> <p>Реакции ароматического нуклеофильного замещения водорода S_NArH являются одним из эффективных методов функционализации электронодефицитных аренов. Изучение механизмов таких реакций является ключом к управлению процессами органического синтеза, лежащими в основе производства многих органических реагентов многоцелевого назначения: мономеров, красителей, фармацевтических препаратов, биологически активных веществ и других практически ценных соединений.</p> <p>В качестве объекта исследования в рамках данной НИР выбрано взаимодействие нитроаренов с карбанионами арилацетонитрилов, при котором реализуется нуклеофильное замещение атома водорода в нитросоединениях. Это приводит к образованию целого ряда перспективных продуктов от хиноноксимов до гетероциклов. Примером последних являются 2,1-бензизоксазолы, получаемые при взаимодействии пара-замещенных нитроаренов с арилацетонитрилами.</p> <p>Полная информация о механизме процессов формирования указанных гетероциклических соединений должна включать данные о последовательности стадий реакции, природе лимитирующей стадии исследуемого процесса, последовательности изменения геометрии и энергии начальных, конечных и переходных состояний на каждом этапе реализации превращений.</p> <p>Выявление указанных характеристик, за редким исключением, не поддается прямому экспериментальному определению, и поэтому требует комбинированных подходов с привлечением экспериментальных данных и теоретических методов, в частности, квантово-химического моделирования. Полученные при этом результаты позволят сделать заключение о ключевых стадиях процесса и превратить его в управляемый и высокоэффективный инструмент органического синтеза.</p> <p>Общей целью данной НИР является построение и обоснование полной модели изучаемых химических процессов в реакциях нуклеофильного замещения водорода в нитроароматических системах, определение закономерностей влияния реакционной способности карбанионов и сигма-комплексов на образование конечных продуктов реакции - хинонмонооксимов и 2,1-бензизоксазолов. Создание полной теоретической модели реакции, выполненное на основании данных препаративных и квантово-химических исследований, как в жидкофазных, так и в твердофазных реакционных условиях, позволит наиболее эффективно использовать данный тип реакций для синтеза широкого ряда практически ценных полифункциональных соединений.</p> <p>По результатам выполнения НИР опубликовано 3 тезисов докладов на конференциях различных уровней и 1 статья в рецензируемом журнале из перечня ВАК. Также с использованием результатов НИР руководителем проекта была подготовлена и успешно защищена диссертационная работа на соискание ученой степени кандидата химических наук по теме «Формирование 2,1-бензизоксазолов в условиях реакции нуклеофильного ароматического замещения водорода».</p> | | |