

<b>Наименование НИР:</b> Структура и реакционная способность анионных промежуточных частиц в реакциях функциональных производных органических соединений.		<p style="text-align: center;"><b>Руководитель</b></p>  <p style="text-align: center;"><b>Русаков Александр Ильич, проф., д.х.н.</b></p>
<b>Заказчик, программа:</b> Рособразование, Ведомственная Программа «Развитие научного потенциала высшей школы».		
<b>Номер:</b> РНП. 2.1.1.1167	<b>Внутренний шифр:</b> НП-426	
<b>Сроки выполнения:</b> 2006-2007г.г.	<b>Коды ГРНТИ:</b> 31.21.15	
<b>Место выполнения:</b> кафедра общей и биоорганической химии, факультет биологии и экологии		
<p><b>Аннотация НИР:</b></p> <p>Систематизированы данные по синтетическим возможностям органических реакций с участием анион-радикалов. Получены сведения по пространственной и электронной структуре и влиянию структуры ряда замещенных полинитробензолов и условий проведения процесса на набор конечных продуктов превращения. Изучено электрохимическое восстановление динитробензолов в апротонной среде и протонирование дианионов. Проведено исследование многоконфигурационными методами электронной структуры анион-радикалов и дианионов динитробензолов. Установлены факторы, существенно влияющие на региоселективность процессов протонирования анион-радикалов. На основе результатов квантово-химических расчетов молекулярных объектов и межмолекулярных взаимодействий построена теоретическую модель поведения анион-радикалов в процессе протонирования одного из нескольких потенциальных реакционных центров с учетом протекающих альтернативных процессов в условиях моновосстановления. Она позволяет планировать высокорегииоселективные синтезы целевых соединений. Полученные закономерности использованы для модификации моновосстановления полиядерных динитросоединений.</p> <p>Рассмотрены закономерности процессов, конкурентно реализующихся при реакциях нуклеофильного замещения водорода. Исследовано взаимодействие нитроаренов с карбанионами арилацетонитрилов. Экспериментально установлено, что взаимодействие нитробензола с фенилацетонитрилом протекает исключительно по пути образования <i>para</i>-хинонмонооксима. Высокая региоспецифичность протекания этого процесса определяется значениями энергии Гиббса. Проведено моделирование структуры и процесса образования <math>\sigma^H</math>-комплексов. Сравнительный анализ энергетических барьеров показал, что определяющей региоспецифичность процесса нуклеофильного замещения водорода по одному из потенциальных реакционных центров для изучаемой реакции, является перенос атома водорода с хиноидного ядра на нитрогруппу.</p> <p>Исследованы закономерности нуклеофильного ароматического замещения галогенов О- и N-нуклеофилами как при активации связи углерод – галоген в арилгалогенидах введением в ароматическое кольцо электроноакцепторных групп (активированное нуклеофильное замещение), так и в условиях неактивированного нуклеофильного замещения. Рассмотрено активированное нуклеофильное замещение в структурах, содержащих несколько реакционных центров.</p> <p>Разработаны методологии, методы получения и созданы методики селективного восстановления и функционализации широкого ряда ароматических систем. Сформулированы рекомендации, реализованы синтезы и испытания практически ценных структур.</p>		