


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»		

Аннотация НИР:

Реакции ароматического нуклеофильного замещения водорода S_NAr^H являются одним из эффективных методов функционализации и периферийной модификации электронодефицитных аренов. Изучение механизмов и установление закономерностей 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.

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 *para*-замещенных нитроаренов с арилацетонитрилами.

Полная информация о механизме процессов формирования указанных гетероциклических соединений, отсутствующая сегодня, должна включать данные о последовательности стадий реакции, и нахождение лимитирующей стадии исследуемого процесса, последовательности изменения геометрии и энергии начальных, конечных и переходных состояний на каждом этапе реализации превращений.

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.

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.

Результаты НИР представлены на конференциях: XIV молодежная конференция по органической химии – Екатеринбург, июнь 2011., IV школа-семинар молодых ученых – Иваново, май 2011., и на Всероссийской научной конференции с международным участием, посвященной Международному году химии, Москва, РУДН, апрель 2011.