

Квантовохимическое исследование реакций ацетилен с гидразонами в суперосновной среде KO^tBu/DMSO

Абсаямов Д.З.

Проблемы, связанные с исследованиями одnoreакторных каскадных сборок, заключаются в сложности экспериментальных анализов в ходе синтеза. Трудности выделения интермедиатов способствуют развитию работ, заключающихся в теоретическом изучении таких химических процессов.

Экспериментально показано, что кетимины могут легко и быстро реагировать с фенилацетиленом в суперосновной среде KO^tBu/DMSO. В тоже время аналогичные им гидразоны способны вступать во взаимодействие с ацетиленом в среде KO^tBu/DMSO только при наличии тозилъного заместителя. Сообщений о реакции синтетически доступного 1-фенил-2-(1-фенилэтилиден)гидразина с фенилацетиленом в суперосновной среде KO^tBu/DMSO найти не удаётся. Осуществление реакции в случае с 1-тозил-2-(1-фенилэтилиден)гидразином и отсутствие реакции в случае 1-фенил-2-(1-фенилэтилиден)гидразина лишь увеличивает интерес к теоретическому изучению механизмов данных взаимодействий.

Анализ полученных результатов квантовохимического исследования позволит ответить на следующие вопросы: возможно ли взаимодействие исследуемых гидразонов с фенилацетиленом в суперосновной среде KO^tBu/DMSO и если взаимодействие возможно, то какая из двух реакций – этинирование или *N*-винилирование – будет преобладать и почему; возможно ли из гидразонов и фенилацетилена каскадное образование сложных гетероциклических соединений, потенциально обладающих биологической и фармацевтической активностью.