

Аннотация проекта Прадедовой А.Г.

«Квантовохимическое моделирование реакции [3+2]- циклоприсоединения *N*-бензилкетимина и фенилацетилен в суперосновной среде КОВu^t/ДМСО»

Сравнительно недавно в Иркутском институте химии им. А.Е. Фаворского был открыт новый тип реакции этинилирования – аза-реакция Фаворского – этинилирование соединений, содержащих кратную C=N связь, в суперосновных средах. Как в случае ацетилен, так и в случае фенилацетилена реакция в достаточно мягких условиях (20 – 40°C, 10 – 60 мин, КОВu^t/ДМСО) приводит к образованию пропаргиламинов.

При попытке распространения этой реакции на бензилкетимины, содержащие кислую CH₂-группу, ацетилен неожиданно проявляет свои электрофильные свойства и реакция приводит к стереоселективному образованию 2-азадиенов с выходом до 80%.

Ожидалось, что реакция между *N*-бензилкетиминами и арилацетиленом также приведёт к какому-то из перечисленных продуктов (азадиену или пропаргиламину), однако реакция привела к образованию арилпирролинов и их окисленной форме – 2Н-пирролам. Механизм этой реакции в настоящее время не установлен.

В рамках метода B2PLYP-D/6-311+G**//B3LYP/6-31+G* с учётом сольватационных эффектов с помощью модели поляризуемого континуума IEF PCM квантовохимически будет исследовано [3+2]-циклоприсоединение *N*-бензил-1-фенилэтан-1-имина к фенилацетилену с образованием 2,3,5-трифенил-1-пирролина в суперосновной среде КОВu^t/ДМСО. Будет установлен наиболее вероятный механизм циклоприсоединения, объяснена наблюдаемая регио- и диастереоспецифичность реакции с преобладанием одного из изомеров.