

**«Квантовохимическое моделирование реакции образования
диспирокетала из 2-метилциклогексанона и фенилацетилен в
суперосновной среде KOH/DMSO»**

Манжуева А. А.

Сравнительно недавно в Иркутском институте химии им. А. Е. Фаворского было продемонстрировано, что взаимодействие циклоалифатических кетонов с фенилацетиленом в KOH/DMSO при 80°C в течение 1ч приводит к диспирокеталам с выходом 16–22% вместе с ожидаемыми по реакции C-винилирования β,γ - и α,β -ненасыщенными кетонами (с выходами 26–57%).

Нами ранее было показано, что в случае взаимодействия незамещенного циклогексанона и фенилацетилен ненасыщенные кетоны являются термодинамическими продуктами, тогда как алколят-ион – кинетическим продуктом, а дальнейшее его превращение в диспирокеталь конкурирует с обратной реакцией этилирования, что и объясняет его невысокий выход.

Однако если в качестве исходного кетона взят 2-метилциклогексанон, то помимо диспирокетала и ненасыщенных кетонов, в продуктах реакции наблюдается также гексагидроазуленон. Еще одно отличие от незамещенного циклогексанона заключается в том, что в случае 2-метилциклогексанона образуется смесь диастереомеров, а также региоизомеров диспирокетала с различными взаимными ориентациями метильных групп.

Целью данной работы является квантовохимическое исследование сборки диспирокетала на примере взаимодействия 2-метилциклогексанона с фенилацетиленом с подробным описанием механизма этой реакции. Будет проведен конформационный анализ строения субстратов, продуктов и интермедиатов реакции, а также оценены термодинамические и кинетические характеристики каждой стадии.