

Квантовохимическое исследование механизма образования пиррольного каркаса из алленилпропинилсульфида в среде $\text{KOH}/\text{N}_2\text{H}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Н. В. Тепляшин

Аннотация

Среди хлорпропенилсульфидов, полученных на основе 2,3-дихлорпропена, особый интерес представляет бис(2-хлорпроп-2-енил)сульфид, в структуре которого присутствует несколько потенциальных реакционных центров. Наличие нескольких центров с различной реакционной способностью определяет перспективы возможного синтетического использования бис(2-хлорпроп-2-енил)сульфида. На его основе можно разработать подходы к получению труднодоступных органических производных серы, имеющих ациклическое или циклическое строение, содержащих разнообразные функциональные группы, олефиновые, алленовые или ацетиленовые фрагменты, представляющие интерес в качестве реагентов, практически важных веществ или их прекурсоров. Ранее уже было показано, что на основе бис(2-хлорпроп-2-енил)сульфида возможен синтез труднодоступных производных тиафенового ряда и других гетероциклов.

В рамках проекта будет проведено моделирование механизмов образования *N*-амино-2-(пропинилсульфанилпропенилсульфанил)-3,5-диметилпиррола в среде гидроксид калия/гидразин-гидрат, в основе которых лежит взаимодействие пропинилтиолят-иона и алленилпропинилсульфида с образованием (1*E*)-1,2-бис(пропинилсульфанил)пропена и его превращение под действием пропенилдиазена или 2-дiazенилпропен-2-ида.

Результаты проведённого исследования позволят выявить закономерности образования гетероциклических структур в основно-восстановительной среде гидроксид калия/гидразин-гидрат. Полученные знания о реакционной способности серосодержащих органических соединений будут нести не только фундаментальный характер, но и могут быть использованы химиками-синтетиками при планировании экспериментов.