

АННОТИРОВАННЫЙ ОТЧЕТ

о результатах НИР по гранту за 2024 год

Конкурс 2024 года на соискание грантов
для поддержки научно-исследовательской работы
аспирантов и молодых сотрудников ИГУ.

Направление Химия и химическая технология

Шифр гранта 091-24-306

1. Наименование НИР по гранту «Квантовохимическое моделирование сборки тетразамещенного пиррола из бензонитрила и трех молекул фенилацетилен в суперосновной среде $\text{KOBu}^t/\text{DMSO}$ »

2. Структурное подразделение (кафедра, лаборатория):
лаборатория квантовохимического моделирования молекулярных систем

3. Исполнитель НИР Орлюк Юлия Алексеевна
(Ф.И.О)

4. Координаты исполнителя НИР yuliya@cc.isu.ru, +7(3952)521211
(телефон, факс, E-mail)

5. Ожидаемые результаты в соответствии с заявленным планом работы:
Получение кинетических и термодинамических характеристик основных и альтернативных маршрутов взаимодействий в системе образования экспериментально наблюдаемого продукта, и оценка вероятности образования побочных продуктов реакции.

6. Основные полученные научные результаты: Методами квантовой химии ($\text{B2PLYP-D3/6-311+G}^{**}/\text{B3LYP-D3/6-31+G}^* + \text{IEF PCM}$) исследован механизм сборки 2-бензил-3,5-дифенил-4-(фенилэтинил)-1*H*-пиррола из фенилацетилен и бензонитрила в суперосновной среде $\text{KOBu}^t/\text{DMSO}$ (анионная модель описания суперосновного центра). Он включает 5 основных стадий: три последовательные стадии этинилирования, внутримолекулярное *N*-винилирование и прототропную перегруппировку. Стадия циклизации с образованием пиррольного кольца является лимитирующей и характеризуется умеренным активационным барьером $\Delta G^\ddagger = 20.7$ ккал/моль, преодолимым в условиях эксперимента (20-25°C, 15 мин.).

7. Предполагаемое использование результатов, в том числе в учебном процессе:
Полученные результаты позволят повысить эффективность синтеза соединений пиррола из исходных ацетилен и нитрила с различными заместителями.

8. Перечень публикаций по результатам работы (статьи, доклады) с приложением оттисков или рукописей, направленных в печать:

Орлюк, Ю. А. Квантовохимическое моделирование механизма сборки пиррола из фенилацетилена и бензонитрила в суперосновной среде KOBut/DMSO / Ю. А. Орлюк, А. С. Бобков, Е. Ю. Шмидт, Н. М. Витковская // Open Science 2024 : сборник тезисов XI Всероссийского молодежного научного форума с международным участием, Гатчина 13-15 ноября 2024 года. – Гатчина: Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова, 2024.

Исполнитель НИР по гранту


(подпись)

Орлюк Юлия Алексеевна
(Ф.И.О.)