

УДК 66.091

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ TMSCL НА ПРИСОЕДИНЕНИЕ РЕАГЕНТОВ  
ГРИНЬЯРА К ТИОХРОНОМам С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ  
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ХИМИИ.**

**Бетехтин А.А. (ИТМО)**

**Научный руководитель – Чалый В.А.** (студент 5 курса ВКХ РАН, сотрудник ИОХ РАН)

**Введение.** Использование методов вычислительной химии сокращает время и затраты на эксперименты, позволяя лучше понять механизмы химических реакций. Медьорганические соединения играют огромную роль в органическом синтезе как алкилирующий реагент, несмотря на некоторые недостатки, такие как низкая растворимость в инертных средах и неустойчивость при высоких температурах. Серосодержащие гетероциклические соединения, хоть и менее изучены, но привлекают все больше внимания в фармацевтике, агрохимии и материаловедении. Внедрение методов вычислительной химии в исследования по медьорганической химии и изучению серосодержащих гетероциклических соединений представляет собой возможность для получения новых знаний и оптимизации процессов синтеза новых материалов.

**Основная часть.** С помощью методов вычислительной химии были поставлены следующие задачи:

1. Определение механизмов реакции: Выявление возможных молекулярных механизмов, включая промежуточные комплексы и переходные состояния.
2. Определение термодинамических и кинетических параметров, таких как энергия активации и константы скорости, для понимания скорости реакции и условий её протекания.
3. Валидация результатов: Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными для проверки и подтверждения достоверности и применимости используемых методов.

В результате проведенной работы с использованием методов вычислительной химии была показана нестабильность одного из интермедиатов в предложенном авторами механизме. В настоящее время мы продолжаем работу по определению правильного механизма реакции.

**Выводы.**

Исследования с использованием методов вычислительной химии показали, что молекула в цепочке химических реакций нестабильна. В настоящее время ведутся работы по определению правильного механизма для каждой реакции в этой цепи.

**Список использованных источников:**

1. Guo, Fenghai & Young, Jayla & Perez, Mina & Hankerson, Holden & Chavez, Alex. (2023). Progress on the Cu-Catalyzed 1,4-Conjugate Addition to Thiochromones. *Catalysts*. 13. 713. 10.3390/catal13040713.
2. Bertz S. H., Miao G., Rossiter B. E., Snyder J. P. *New Copper Chemistry*. 25. Effect of TMSCl on the Conjugate Addition of Organocuprates to  $\alpha$ -Enones: A New Mechanism // *Journal of the American Chemical Society*. 1995. Vol. 117. No. 44. pp. 11023-11024.
3. Woodward, Simon. (2000). Decoding the 'black box' reactivity that is organocuprate conjugate addition chemistry. *Chemical Society Reviews - CHEM SOC REV*. 29. 393-401. 10.1039/b002690p.
4. Snyder, James P. (1995). Mechanism of Lithium Cuprate Conjugate Addition: Neutral Tetracoordinate CuI Cuprates as Essential Intermediates. *Journal of the American Chemical Society*, 117(44), 11025–11026. doi:10.1021/ja00149a033.
5. Rodriguez, Cristian & Vázquez, Álvaro & Nudelman, Norma. (2008). Conjugate additions of furylcuprates to  $\alpha$ -enones. The effect of the copper precursor and of TMSCl used as additive.

Arkivoc. 2008.