



Международная научная конференция
студентов, аспирантов и молодых учёных

ЛОМОНОСОВ – 2024

Секция «Химия»

12–26 апреля 2024

Материалы конференции

lomonosov2024.chem.msu.ru



УДК 54
ББК 24я43
М34

Отв. ред.: Дзубан А.В.

М34 **Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2024», секция «Химия».** – М.: Издательство «Перо», 2024. – 57 МБ. [Электронное издание]. – Систем. требования: процессор x86 с тактовой частотой 500 МГц и выше; 512 Мб ОЗУ; Windows XP/7/8; видеокарта SVGA 1280x1024 High Color (32 bit). – Загл. с экрана.

ISBN 978-5-00244-410-6

ISBN 978-5-00244-410-6

УДК 54
ББК 24я43
© Авторы статей, 2024

О КОНФЕРЕНЦИИ

В 2024 году традиционная **Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов»** проходила с 12 по 26 апреля в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова в рамках Международного молодёжного научного форума «Ломоносов». Председателем центрального оргкомитета является ректор МГУ академик Виктор Антонович Садовничий.

Основная цель конференции «Ломоносов» — развитие творческой активности студентов, аспирантов и молодых учёных, привлечение их к решению актуальных задач современной науки, сохранение и развитие единого международного научно-образовательного пространства, установление контактов между будущими коллегами.

Для участия в конференции приглашались студенты (специалисты, бакалавры или магистры), аспиранты, соискатели и молодые учёные (без степени кандидата наук) любой страны мира в возрасте до 35 лет (включительно) — учащиеся или сотрудники российских и зарубежных вузов, аспиранты и сотрудники научных учреждений.

Официальные языки конференции: русский и английский.

В 2024 году работа конференции проходила по 40 секциям, отражающим все основные направления современной фундаментальной и прикладной науки.

Секция «Химия» традиционно включала в себя следующие подсекции:

1. Аналитическая химия
2. Высокомолекулярные соединения
3. Дисперсные системы и поверхностные явления
4. История химии и методика преподавания
5. Катализ
6. Квантовая химия и строение молекул
7. Неорганическая химия I (студенты)
8. Неорганическая химия II (аспиранты и молодые учёные)
9. Органическая химия
10. Радиохимия и радиоз экология
11. Химическая термодинамика и химическая кинетика
12. Химическая технология и новые материалы
13. Химия живых систем, нанобиоматериалы и нанобиотехнологии
14. Электрохимия, химия высоких энергий, спиновая химия

Было подано 1235 заявок, принято 1170, из них 511 устных докладов и 659 стендовых. 1032 автора приняли участие.

Секция «Химия» в 2024 году работала в очном формате на базе химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова (Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3). В силу особых обстоятельств у участников часть докладов была также заслушана дистанционно с помощью систем видео-конференц-связи.

Вся информация о содержании секции «Химия» и итогах её работы доступна на сайте <https://lomonosov2024.chem.msu.ru/>.

Квантово-химическое исследование механизма IEDDA-реакции с имин-енаминами

Проломов И.В.^{1,2}, Кривошапов Н.В.², Медведев М.Г.²

Студент, 5 курса специалитета

¹Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия

E-mail: ilyavpro@gmail.com

Исследования по синтезу гетероциклов с высокой степенью замещения по сей день остаются актуальной темой в поиске перспективных биологически активных и противобактериальных веществ. Большое влияние на эту область оказали работы Тейлора и Роу по получению пиридинов [1] и пиримидинов [2] посредством разработанной ими одностадийной и высокоэффективной методологии связанного ими́на-енамина (TIE), образующегося *in situ*.

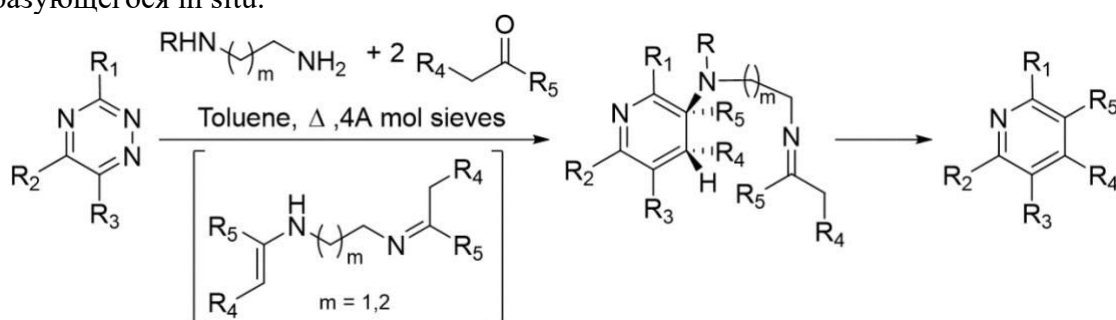


Схема 1. Получение пиридинов методом имин-енамина (TIE).

В нашем исследовании при помощи метода функционала плотности впервые был исследован TIE-механизм реакции Дильса-Альдера имин-енамина с триазиновыми и тетразиновыми производными. Полученные результаты свидетельствуют о том, что ранее предположенное в литературе цвиттер-ионное переходное состояние [3] не является энергетически доступным и не может быть частью пути реакции. Напротив, нами был предложен и обоснован альтернативный механизм, в котором демонстрируется неожиданная роль гидрофобного эффекта и образующейся *in situ* молекулы воды, которая выступает в роли промотора протона и способна значительно понизить энергию лимитирующей стадии ароматизации интермедиата.

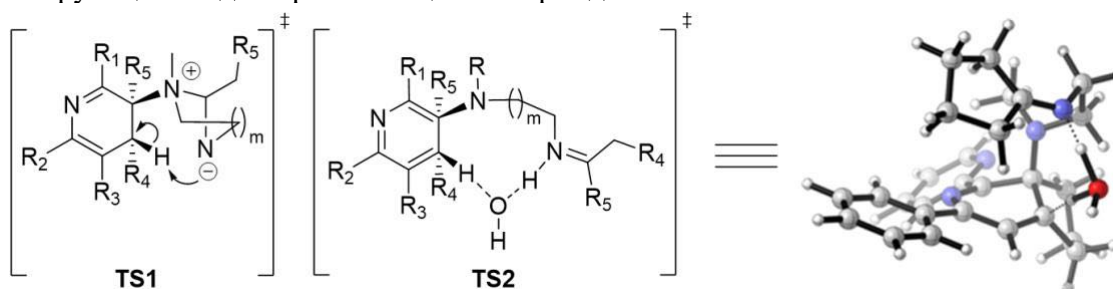


Рис. 1. TS1 цвиттер-ионное переходное состояние; TS2 переходное состояние с молекулой воды в качестве промотора протона.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 22-73-10124).

Литература

1. Raw S.A., Taylor R.J.K. Highly substituted pyridines via tethered imine–enamine (TIE) methodology // Chem. Commun. 2004. P. 508-509.
2. Geyelin P.H., Raw S.A., Taylor R.J.K. The preparation of highly substituted pyridazines via a tethered imine-enamine (TIE) procedure // Arkivoc. 2006. Vol. 2007, P. 37-45.
3. Fernández Sainz Y., Raw S.A., Taylor R.J.K. Improved Methodologies for the Preparation of Highly Substituted Pyridines // J. Org. Chem., 2005. Vol. 70, P. 10086-10095.