

Изучение влияния эффектов сольватации на эффективность нековалентного катализа донорами галогенной и халькогенной связи

А.А. Сысоева,¹ Д.С.Болотин¹

¹ИХ СПбГУ, 199034, Россия, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7-9

E-mail: sysoewa.alexandra.5@yandex.ru

Доноры галогенной и халькогенной связи привлекают всё больше внимания в качестве нековалентных органокатализаторов за счёт своих преимуществ перед традиционными металлокомплексными катализаторами, а именно низкой чувствительности к воздуху и влаге. В наших предыдущих работах было показано, что доноры галогенной и халькогенной связи (в частности, иодониевые, сульфониевые и селенониевые соли) эффективны в многокомпонентной реакции Грёбке-Блэкбёрна-Бьенеме [1,2], но точные каталитические пути на сегодняшний день однозначно не были установлены.

В данной работе были изучено влияние природы катализатора и растворителя на ход реакции образования основания Шиффа (**Рисунок 1**), проведён корреляционный анализ для серии *para*-замещённых бензальдегидов, который позволил подтвердить предположения о конкурентном связывании катализатора с субстратами реакции, а также проведены квантово-химические расчёты энергии Гиббса связывания катализаторов с реагентами и энергии Гиббса активации модельной реакции. В случае нековалентного органокатализа решающую роль в эффективности донора галогенной или халькогенной связи играет его связывание с электрофилом, который необходимо активировать в реакции. Чем эффективнее такая ассоциация, тем выше скорость реакции. Поэтому для избежания конкурентного связывания с нуклеофилом реакции требуется использовать растворитель, наилучшим способом сольватирующий нуклеофил.

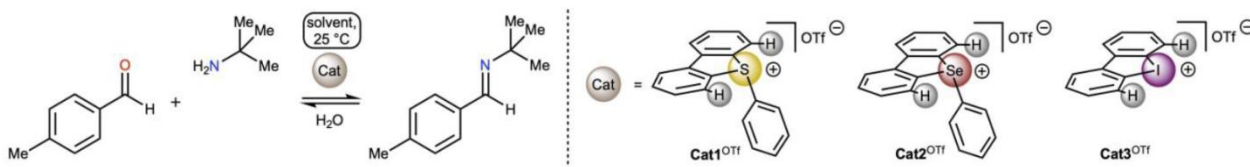


Рисунок 1. Модельная реакция и структуры используемых катализаторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта СПбГУ 101746143 и гранта РФФ № 20-73-10013.

Литература

- [1] M.V. Il'in, A.A. Sysoeva, A.S. Novikov, and D.S. Bolotin., *J. Org. Chem.* **2022**, 87, 7, 4569-4579
- [2] M.V. Il'in, A.S. Novikov, and D.S. Bolotin., *J. Org. Chem.* **2022**, 87, 15, 10199-10207
- [3] A.A. Sysoeva, A.S. Novikov, M.V. Il'in, and D.S. Bolotin., *Catal. Sci. Technol.*, **2023**, Accepted Manuscript