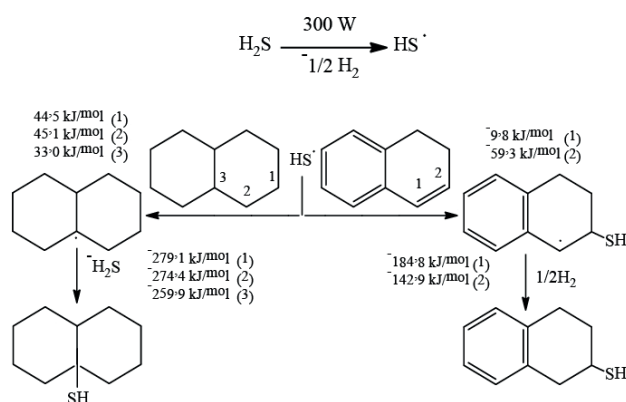


ПРИМЕНЕНИЕ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ИНИЦИИРОВАНИЯ РЕАКЦИЙ H₂S С КОНДЕНСИРОВАННЫМИ БИЦИКЛИЧЕСКИМИ УГЛЕВОДОРОДАМИ

Вахромова Н.А., Шинкарь Е.В., Сенкевич М.А., Берберова Н.Т.

ФГБОУ ВО «Астраханский государственный технический университет»,
414056, Астрахань, ул. Татищева 16
e-mail: natasha-100997@mail.ru

В последнее время наибольшую популярность в органическом синтезе приобретает микроволновое облучение (МВО) ввиду ряда преимуществ. Ранее нами был успешно проведен электро- и микроволновой синтез продуктов тиолирования циклоалканов C₅-C₈ с участием H₂S [1,2]. В настоящей работе изучены реакции тиолирования декалина I и 1,2-дигидронафталина II с H₂S в условиях МВО (30 мин).



Квантово-химический расчет тепловых эффектов стадий реакций проведен с применением программы Gaussian 03 (функционал BLYP, базис 6-31G(d,p)). В качестве вторичных продуктов превращений RSH получены R₂S₂ при соотношении 1,0:3,6 (I); 1,0:4,4 (II). С использованием программы PASS установлена потенциальная возможность (с вероятностью 75,2-87,0 %) применения RSH в качестве мукомебранных протекторов, стимуляторов функции почек и препаратов для лечения фобических расстройств.

Литература

1. Берберова Н.Т., Шинкарь Е.В. и др. ЖОХ, 2015, 85, 697.
2. Шинкарь Е.В., Берберова Н.Т. и др. Тез. докл. XX Мендел. съезда по общей и прикладной химии, 2016, Екатеринбург, 375.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-29-24001