

## ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОФИЛЬНОГО ПРИСОЕДИНЕНИЯ К С=C СВЯЗИ НА ПРИМЕРЕ СКВАЛЕНА

Павлова О.В.,<sup>а</sup> Калистратова А.В.,<sup>а</sup> Соловьева И.Н.,<sup>а</sup> Курдюков А.И.,<sup>б</sup> Коверда М.В.,<sup>а</sup>  
Коверда А.А.,<sup>а</sup> Урядов В.Г.,<sup>б</sup> Офицеров Е.Н.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,  
125047, Москва, Миусская площадь, 9,  
e-mail: angel356@mail.ru

<sup>б</sup>Казанский государственный технологический университет, 420015, Казань, улица Карла Маркса, 68

Сквален (2,6,10,15,19,23-гексаметилтетракоза-2,6,10,14,18,22-гексаен) – это природный углеводород тритерпенового ряда. Сквален является промежуточным соединением в биологическом синтезе стероидов, участвует в обмене веществ и может оказаться реперной молекулой в исследовании механизма электрофильного присоединения.

Не смотря на исследования фундаментальной реакции органической химии – электрофильного присоединения  $Ad_E$  – остаётся достаточно нерешенных проблем, среди которых можно выделить флуктуацию порядка реакции по электрофильному реагенту, в частности, по кислоте НХ, причины варьирования соотношения цис-транс в продуктах присоединения, одно- или двухстадийный механизм реакции и ряд других.

В ранее проведенных исследованиях, в которых квантово-химическими расчетами было показано, что в обычных классических условиях механизм реакции  $Ad_E$  одностадийный и переходит в двухстадийный при уменьшении нуклеофильности, а для описания правила Марковникова использовался принцип наименьшего изменения структуры на основе топологических индексов<sup>1</sup>. В нашей работе представлены данные по использованию момента инерции вращательного движения  $J$ , как численной характеристики пространственной структуры молекул в прогнозировании региоселективности  $Ad_E$  и зависимости реакционной способности и направления присоединения к сквалену от условий проведения реакции, в частности, от растворителя. Обсуждается соотношение реакций присоединения и домино-реакции при  $Ad_E$  и продемонстрирована принципиальная разница в реакциях ферментативного и химического каталитического присоединения к сквалену.

Полученные нами данные можно использовать в разработке нового поколения носителей лекарственных средств в рамках направления скваленирование (скваленистика).

### Литература

1. Урядов В.Г., Офицеров Е.Н. Механизм активации реакции циклоприсоединения в растворе – Казань: КГТУ, 2009. – 432.