

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ О-СИЛИЛУРЕТАНА, СОДЕРЖАЩЕГО ПИРАЗОЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ

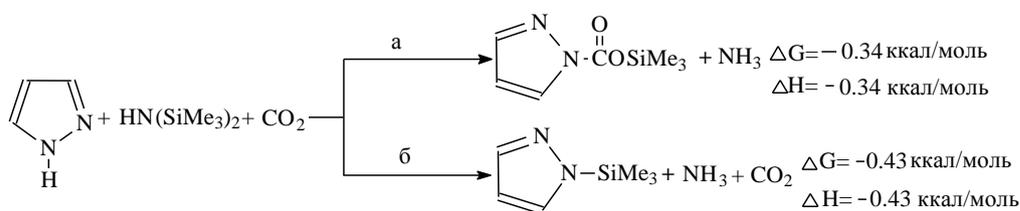
В.М. Панфилова, Л.О. Белова, А.Д. Кирилин, С. П. Князев

Московская государственная академия тонкой химической технологии

им М. В. Ломоносова

Среди азотсодержащих кремнийорганических соединений особое место занимают О-силилуретаны, которые находят применение в различных областях науки и техники. Однако, до настоящего времени не удалось получить О-силилуретаны, содержащие диазольные фрагменты. Целью данной работы является изучение возможности получения О-силилуретанов, содержащих диазольные фрагменты, методами компьютерной химии в приближении V3LYP/6-31G(d p).

Изучено получение О-силилуретана реакцией N-силоксикарбонилирования. Данное взаимодействие может протекать по двум направлениям: (а) – образование О-силилуретана путем взаимодействия пиразола, гексаметилдисилазан и диоксида углерода; б) образование продукта силилирования, путем взаимодействия пиразола, гексаметилдисилазана и диоксида углерода. Экспериментально установлено, что преимущественно реакция идет по направлению (б).



Процесс N-силоксикарбонилирования имидазола

Для объяснения преимущественного протекания реакции (б) было проведено расчет и анализ термодинамических факторов реакций (а) и (б). Установлено, что термодинамические параметры реакций (а) и (б) близки с небольшим преимуществом реакции (б). По-видимому, объяснение образования преимущественно продукта силилирования требует учета кинетического фактора, путем моделирования переходных состояний реакций (а) и (б).