

ФГБУН Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук.

Трофимова Дарья Владимировна, trofimchem@mail.ru

Коллектив:

1. Трофимова Дарья Владимировна, студент 5 курса ФЕН НГУ, кафедра органической химии, руководители Заикин П.А. д-р хим. наук. проф. Бородкин Г.И., дипломная работа;
2. Заикин Павел Анатольевич, м.н.с. лаборатории изучения механизмов органических реакций Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук;

Тема: Квантово-химическое исследование реакций фотохимического [2+2]-циклоприсоединения 1,1-дифтор-7-OR-2(1H)-нафталинонов и 1,1,8-трифтор-7-OR-2(1H)-нафталинонов.

Для лечения вторичной катаракты были разработаны системы на основе кумарина для фотоконтролируемой активации и доставки лекарств из полимера интраокулярной линзы. Однако применение кумаринов затруднено вследствие раскрытия их лактонового кольца в нуклеофильных средах, что приводит к побочным продуктам при фотохимической активации, поэтому ведется поиск новых фотоактивных групп. Мы предполагаем, что в качестве светочувствительных связывающих групп могут быть использованы 7-OR-1,1-дифтор-2(1H)-нафталинон и 1,1,8-трифтор-7-OR-2(1H)-нафталинон. фотохимическое [2+2] -циклоприсоединение открывают широкие возможности структурной модификации органических молекул и создания новых структурных типов органических соединений. Квантово-химическое моделирование необходимо для предсказания реакционной способности соединений и интерпретации полученных экспериментальных данных.

Были рассчитаны энергии сигма-комплексов, образующихся при фторировании 2,7-дигидроксинафталина, 1-фтор-2,7-дигидроксинафталина, 1,8-дифтор-2,7-дигидроксинафталина, а также 7-OR-1,1-дифтор-2(1H)- и 1,1,8-трифтор-7-OR-2(1H)-нафталинонов. Структуры сначала оптимизировали с помощью программы CheBio3D Ultra методом PM3, дальнейший расчет проводили на кластере GAMESS B3LYP 6-31-Gds. Анализ результатов и их визуализация не проводилась. Впечатления положительные.