

## **DFT-исследование механизма реакции Бингеля на примере получения производного фуллерена, содержащего дитерпеновый фрагмент**

© Саттарова<sup>1,2+</sup> Алина Фанилевна, Биглова<sup>1\*</sup> Юлия Николаевна,  
Корнилов<sup>1\*</sup> Дмитрий Анатольевич, Мустафин<sup>1,2\*</sup> Ахат Газизьянович

<sup>1</sup> Кафедра физической химии и химической экологии. Институт химии и защиты в чрезвычайных ситуациях. Уфимский университет науки и технологий. ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076.

Республика Башкортостан. Россия. Тел.: +7 (347) 229-97-07. E-mail: brux1995@mail.ru

<sup>2</sup> Лаборатория органических функциональных материалов. Уфимский институт химии УФИЦ РАН. Пр. Октября, 71. г. Уфа, 450054. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: +7 (347) 235-55-60.

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** фуллерен C<sub>60</sub>, производные фуллерена, циклоприсоединение Бингеля, DFT, переходные состояния, интермедиаты, метанофуллерены.

### **Аннотация**

Статья содержит результаты квантово-химического исследования реакции нуклеофильного циклопропанирования со стабилизированными карбанионами (или реакции Бингеля), проведенного на примере получения биологически активного производного фуллерена, содержащего дитерпеновый фрагмент. Методом теории функционала плотности, с помощью гибридного функционала B3LYP и валентно расщепленного базисного набора Попла с добавлением поляризационной и диффузионных функций, рассчитаны оптимальные геометрические характеристики исходных веществ, реакционноспособного нуклеофила, промежуточного карбаниона и переходного комплекса на пути превращения фуллерен → продукт. Выявлены и описаны ключевые изменения структурных параметров реакции Бингеля, к которым относятся: (1) разрыв атакующей двойной связи фуллерена; (2) нарушение его исходной симметрии, заключающееся, в первую очередь, в увеличении двугранного угла связи, прилегающей к функционализированной [6,6]-связи бензольного кольца C<sub>60</sub> и изменении типа гибридизации атакующего атома углерода; (3) постепенное уменьшение угла наклона связи между метиленовым углеродом и функциональной части субстрата по отношению к атакующей двойной связи фуллерена; и, наконец, (4) отрыв галогена и его высвобождение в виде аниона. Проведение сопоставительного анализа выявило, что превращение исходных веществ в продукт характеризуется величинами энергетического барьера, составляющими 7.5 и 9.3 ккал·моль<sup>-1</sup> при использовании бром- и хлорметилкетона в качестве циклопропанирующего субстрата, соответственно.

### **Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:**

Саттарова А.Ф., Биглова Ю.Н., Корнилов Д.А., Мустафин А.Г. DFT-исследование механизма реакции Бингеля на примере получения производного фуллерена, содержащего дитерпеновый фрагмент. *Бутлеровские сообщения*. 2023. Т.75. №8. С.9-17. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-75-8-9

### **Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:**

Саттарова А.Ф., Биглова Ю.Н., Корнилов Д.А., Мустафин А.Г. DFT-исследование механизма реакции Бингеля на примере получения производного фуллерена, содержащего дитерпеновый фрагмент. *Бутлеровские сообщения А*. 2023. Т.6. №3. Id.7. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RA/23-6-3-7