

Селективность реакций электрофильного замещения в алкилбензолах

© Крылов Евгений Николаевич,^{1*} Зубанова Евгения Александровна,¹
Иванова Юлия Михайловна,¹ Вирзум Людмила Викторовна²
и Груздев Матвей Сергеевич³

¹ Кафедра органической и биологической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (4832) 37-37-03. E-mail: EugenNKrylov@gmail.com

² Кафедра химии. Ивановская государственная сельскохозяйственная академия им. Академика Д.К. Беляева. Ул. Советская, 45. г. Иваново, 153000. Россия. E-mail: virzum@list.ru

³ Институт химии растворов Российской Академии наук. Ул. Академическая, 1. г. Иваново, 153045. Россия. E-mail: gms@isc-ras.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ароматическое электрофильное замещение, алкилбензолы, субстратная и позиционная селективность.

Аннотация

Исследованы реакции электрофильного замещения (нитрование и бромирование) в бензоле и его некоторых моно- и диалкильных производных с алкилами C1-C4 нормального и изостроения. Используются новые реагенты (*N*-бромсукцинимид, нитрат мочевины) в среде уксусной и трифторуксусной кислот, а также ионной жидкости ВМІМВr и ВМІМВr₃, определены субстратная и позиционная селективности процесса и условия синтеза некоторых изомеров, представляющих интерес для фармацевтической химии. Проведен теоретический анализ селективности реакции нитрования производных бензола с использованием теории функции Фукуи, обнаружены линейные корреляции селективности реакции и этого параметра, что указывает на возможность теоретического описания реакций ароматического электрофильного замещения на основе динамических квантовохимических индексов реакционной способности.