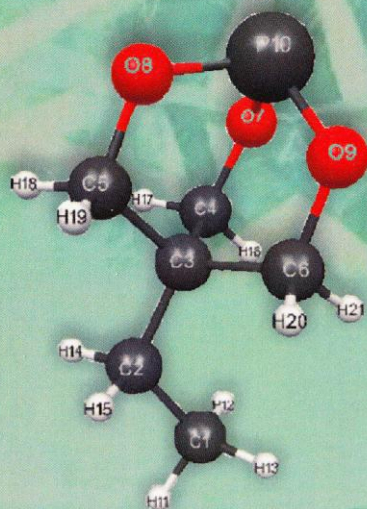


В.А. Бабкин, В.Ю. Дмитриев,
Г.А. Савин, Г.Е. Заиков, А.И. Рахимов

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
МЕХАНИЗМА АЦИЛИРОВАНИЯ БИЦИКЛОФОСФИТОВ
ХЛОРАНГИДРИДАМИ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ**



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
АРХИТЕКТУРНО-СТРОИТЕЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Себряковский филиал

ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ИНСТИТУТ БИОХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ РАН, г. Москва

Волгоград 2011

УДК 577.175.522

ББК 24.13

К32

Авторский коллектив:

профессор, доктор химических наук,
академик Международной академии наук «Контенант»,
лауреат Международного конкурса НИР на приз «Бриллиант»
Леонардо да Винчи (Кэмбридж) **В. А. Бабкин** (СФ ВолгГАСУ);
аспирант **В. Ю. Дмитриев** (ВолгГАСУ);
доцент, кандидат химических наук **Г. А. Савин** (ВГПУ);
профессор, доктор химических наук,
академик Американского химического общества,
член Королевского химического общества (Великобритания), академик
Международной академии творчества (Москва – Сан-Диего, Россия – США),
академик Международной академии наук (Мюнхен, Германия),
заслуженный деятель науки РФ **Г. Е. Заиков** (ИБХФ, г. Москва);
профессор, доктор химических наук, академик РАЕН **А. И. Рахимов** (ВГТУ)

Рецензенты:

доктор технических наук, профессор,
заведующий кафедрой общей и прикладной химии, член-корреспондент
Российской инженерной академии наук, заслуженный работник
высшей школы Российской Федерации **В. Т. Фомичев** (ВолгГАСУ, г. Волгоград);
доктор химических наук, профессор, заведующая лабораторией
химической стойкости полимеров **К. З. Гурмангалиева**
(ИХФ им. Н. Н. Семенова РАН, г. Москва)

ISBN 978-5-9669-0824-9

- © Бабкин В. А., Дмитриев В. Ю., Савин Г. А.,
Заиков Г. Е., Рахимов, А. И., 2011
- © ГОУ ВПО «Волгоградский государственный
университет», 2011
- © СФ ГОУ ВПО «Волгоградский государственный
архитектурно-строительный университет», 2011
- © ГОУ ВПО «Волгоградский государственный
педагогический университет», 2011
- © ГОУ ВПО «Волгоградский государственный
политехнический университет», 2011
- © Институт биохимической физики РАН, 2011



ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	6
1. ЗНАЧЕНИЕ БИЦИКЛОФОСФИТОВ И ИХ ПРОИЗВОДНЫХ	7
2. ОГРАНИЧЕНИЯ И ПРИМЕНИМОСТЬ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИХ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ.....	11
3. РЕЗУЛЬТАТЫ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИЗМА СИНТЕЗА	
5-АЦЕТИЛОКСИМЕТИЛ-1,3,2-ДИОКСОФОСФОРИНАНА	21
3.1. Оценка квантово-химическим методом АВ ІNІТІО кислотно-основных свойств реагентов и продукта реакции – 5-ацетилоксиметил-2-хлор-5-этил-1,3,2-диоксафосфоринана.....	21
3.2. Квантово-химическое исследование реакции прямого ацилирования бициклофосфитов ацилгалогенидами	26
4. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА СИНТЕЗА	
1-[2-(О-АЦЕТИЛМЕТИЛ)-3-О-АЦЕТИЛ-2-ЭТИЛ]-МЕТИЛДИХЛОРОСФИТА.....	39
4.1. О связи кислотной силы компонентов синтеза 1-[2-(о-ацетилметил)-3-о-ацетил-2-этил]-метилдихлорфосфита.....	39
4.2. Квантово-химическое исследование механизма синтеза 1-[2-(о-ацетилметил)-3-о-ацетил-2-этил]-метилдихлорфосфита.....	45
5. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА СИНТЕЗА	
2,2-БИ-(О-АЦЕТИЛОКСИМЕТИЛ)-1-О-АЦЕТИЛБУТАНОЛА	56
5.1. Квантово-химический расчет и оценка кислотной силы компонентов в процессе синтеза 2,2-би-(о-ацетилоксиметил)-1-о-ацетилбутанола	56
5.2. Квантово-химическое исследование механизма синтеза 2,2-би-(о-ацетилоксиметил)-1-о-ацетилбутанола	62
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	73
ВЫВОДЫ.....	76
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	77
VIBLIOGRAPHY	85
ABSTRACT.....	92