

О наших выпускниках!

Химики ТПУ первыми в мире доказали механизм прямого получения ароматических аминов из бензола

Команда ученых-химиков Томского политехнического университета определила механизм прямого электрофильного аминирования и предсказала пути его осуществления. Политехники доказали наиболее перспективный метод быстрого и экономичного получения ароматических аминов. Это одни из самых востребованных продуктов органического синтеза в мире, которые используются в производстве лекарств, красителей, шин и полимеров. Результаты проведенных исследований [опубликованы в журнале Chemistry Select](#).

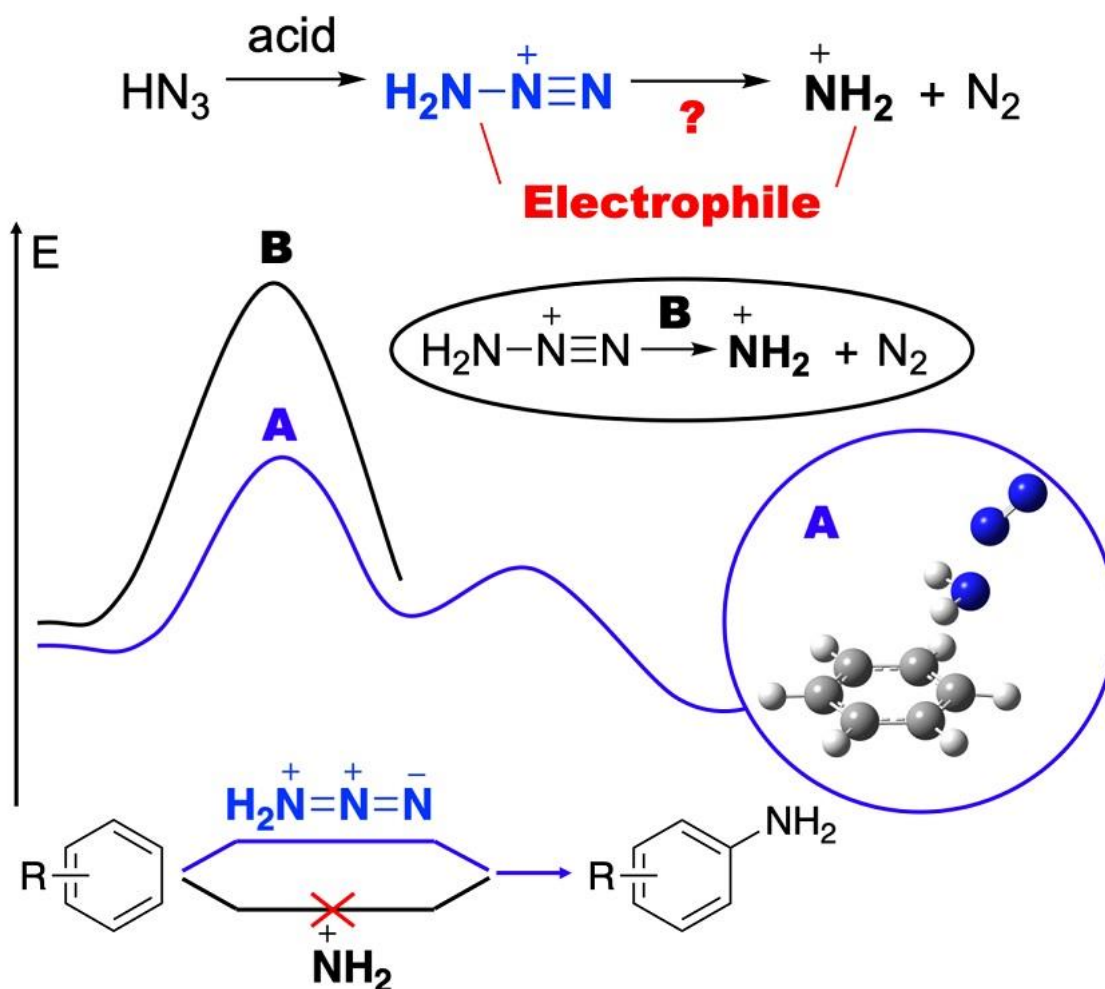


Фото: Абстракт механизма

«Все существующие методы получения ароматических аминов подразумевают несколько стадий — ряд химических реакций, которые занимают много времени и реагентов. Поэтому "голубой мечтой" химиков всегда была реакция электрофильного аминирования — осуществление прямого соединения бензольного ядра и аминогруппы. Такая реакция позволяет получать продукт всего в одну стадию», — рассказывает руководитель проекта, профессор Научно-образовательного центра Н.М. Кижнера ТПУ **Виктор Филимонов**.

По его словам, в этом направлении работают ученые из разных стран, в том числе работал лауреат Нобелевской премии Джордж Ола. Но никому еще не удавалось добиться результатов, которые могли бы широко применяться на практике. Как считает ученый, одна из причин этого — малоизученность, и, как следствие, непонимание химиками природы указанной реакции.

«Если химик не понимает механизм реакции, он не может предвидеть ее результаты и выбрать путь и условия эффективного получения целевых продуктов. Поэтому наша задача состояла в том, чтобы впервые продвинуться за пределы гипотез и доказать механизм электрофильного аминирования, а на его основе уже найти условия эффективной реализации, — подчеркивает профессор. — За два года с помощью современных методов квантовой химии нам удалось теоретически описать все элементарные стадии химических превращений, протекающих при аминировании. А, главное, найти ключевую частицу — химики называют ее "интермедиа́т", — которая обеспечивает образование нужного продукта. В данной реакции это оказалась аминодиазониевая соль. Надеемся, что наша работа даст импульс и подскажет химикам пути реального осуществления их многолетней мечты — прямого синтеза анилина из бензола».

Теоретические вычисления политехники подтвердили экспериментально. Благодаря этому стало ясно, какие исходные вещества и в каких условиях нужно использовать для прямого синтеза ароматических аминов.

«Важно отметить, что также в ходе исследования мы разработали абсолютно новый квантово-химический метод визуализации или наблюдения за изменениями атомных и молекулярных орбиталей, преобразованием их форм и распределением в пространстве в ходе химических реакций».

Этот метод является универсальным и будет использован как в научной работе, так и обучении студентов», — отмечает Виктор Филимонов.

Работа была выполнена аспиранткой ТПУ **Ксенией Станкевич** и студенткой ТПУ **Анастасией Лавриненко** под руководством **Виктора Филимонова**, а также научным сотрудником Алтайского государственного университета **Александром Бондаревым**. Добавим, что в настоящее время Ксения Станкевич получила стипендию Фулбрайта и работает в США в университете Монтана, где продолжает исследование. Проект поддержан грантом Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) и проектом ВИУ ТПУ.

Источник: <https://news.tpu.ru/news/2019/05/23/34622/>