



SINTEZA ȘI REACTIVITATEA UNOR COMBINAȚII
CARBONILICE ALE COMPUȘILOR
HETEROCICLICI AROMATICI

Teză susținută pentru obținerea titlului de doctor în domeniul de doctorat
CHIMIE
(sinteză)

Autor: POP OANA-RALUCA

Data susținerii: 25.06.2010

Conducător științific: Prof. dr. Carol Csunderlik

Referenți științifici: Prof. dr. Mircea Diudea
Prof. dr. ing. Dan Ciubotariu
Conf. dr. Ing. Mihai Medeleanu

Rezumat: Scopul tezei de doctorat îl reprezintă studiul obținerii și reactivității aldehidelor heterociclice, în special alaldehidelor azolice în care grupa formil este grefată în poziția 2 a scheletului heterociclic. Au fost realizate atât determinări experimentale, cât și calcule cuanto-chimice privind reactivitatea derivaților azolici în reacția de hidroliză, caracterizarea structurii stării de tranziție a reacției de adiție nucleofilă la aldehidele azolice. De asemenea, prin intermediul metodelor computaționale au fost abordate aspecte ale stabilității și caracterului aromatic ale heterobenzenilor cu elemente din grupa a 15-a. Rezultatele studiului reactivității 2-diclorometilbenzimidazolului în reacția de hidroliză bazică confirmă faptul că, comportarea diferită a diclorometilbenzimidazolului față de cea a derivaților dihalogenometil benzenici se datorează prezenței grupei aminice secundare a scheletului benzimidazolic care favorizează un atac nucleofil intermolecular și conduce la obținerea dimerilor ciclici. Studiul stării de tranziție a adiției nucleofile a ionului hidroxil la 2-formilimidazol, respectiv 2-formiliazol a arătat că adiția nucleofilă a ionului hidroxil la azol-2-carboxaldehide decurge în conformitate cu modelul Cieplak, explicat prin efectul antiperiplanar. Astfel, interacțiunile dintre legătura C=N și legătura în curs de formare C-O vor stabiliza starea de tranziție (geometria stării de tranziție confirmă acest punct de vedere, grupa HO⁻ și legătura C=N găsindu-se în plane diferite). În ceea ce privește evaluarea caracterului aromatic al heterobenzenilor substituiți cu elemente din grupa a 15-a, s-au folosit o serie de indici magnetici (NICS(0) și NICS(1)) și indici geometrici (Bird, AVGNEXT, ADIFFPC). Heterobenzenii pentru care s-au obținut valori maxime sau apropiate de cele obținute în cazul benzenului sunt cei ai căror parametrii geometrici, îndeosebi unghiurile de 120° dintre legături, sunt similari cu cei ai moleculei benzenului. S-a ajuns astfel la concluzia că simetria acestui tip de compuși este cea care influențează major rezultatele predicției caracterului aromatic al acestei serii de heterobenzeni.

Principalele contribuții revendicate: Studiul teoretic al reactivității dihalogenometil-derivaților în reacția de hidroliză bazică; Analiza conformațională a 2-formil-azolilor; Localizarea stărilor de tranziție a adiției nucleofile a ionului hidroxil la 2-formilazoli; Evaluarea stabilității heterobenzenilor substituiți cu elemente din grupa a 15-a, Cuantificarea caracterului aromatic al heterobenzenilor substituiți cu elemente din grupa a 15-a prin intermediul criteriilor geometric și magnetic.

Nr. Pagini: 138 **Nr. Figuri:** 43 **Nr. Tabele:** 49 **Nr. de titluri bibliografice:** 166

Valorificări până la momentul susținerii tezei:

Nr. articole publicate în reviste de specialitate: 3

Nr. lucrări comunicate la conferințe și congrese: 2

Nr. rapoarte de cercetare (referate de doctorat, granturi ș.a.): 0

Catalogarea în seriile Teze de doctorat ale UPT – Editura Politehnica:

Seria: 2 **Nr:** 10 **ISSN:** 1842-8444 **ISBN:** 978-606-554-112-2