**Ефикасна синтеза нових триазола који укључују барбитурне мотиве *via* [3+2] циклоадиционе реакције: Експериментална и теоријска студија**

МЕЈДАЈ ДАРУДИ,1 ЈАГУБ САРАФАЈ,[[1]](#footnote-1),\* МЕЈШИД АМЗИЛУИЕН 2

*1 Одсек за органску хемију,Хемијски факултет, Универзитет у Мејзедндерану, 47416 Бабалзар, Иран*

*2Одсек за хемију, Огранак у Џујбару, Исламски Азед Иниверзитет, Џујбар, Иран*

*Извод:* У овом раду је описана синтеза у добром приносу нових деривата триазола са барбитуратним мотивима. Алкин је приређен Кневенагеловом реакцијом барбитурних деривата са *ortho* и *para* *O*-пропаргилованим хидроксил-бензалдехидом. Механизам и региоселективност ове [3+2] циклоадиционе (*CA*) реакције испитивани су коришћењем теорије функционала густине (*DFT)* на B3LYP/6-31+G(d) нивоу теорије. Рачунарске студије показују да је ди-бакром катализовани вишестепени механизам, који укључује интермедијер са шесточланим прстеном, најповољнија реакциона путања. Регио­селек­тив­ност је објашњена преко интеракција граничних орбитала (*FMO*), локалне и глобалне електрофилности, те индекса нуклеофилности. Сагласно томе, најповољније интеракције за ди-бакар ацетилиде су у доброј сагласности са опаженом региоселективношћу, док се за некатализовану реaкцију добијају потпуно супротни резултати.

*Кључне речи:* Триазоли; Барбитурати; *DFT* студије*;* Механизам*.*

1. \*Corresponding author. E-mail: ysarrafi@umz.ac.ir [↑](#footnote-ref-1)