



# КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ КОНДЕНСАЦИИ И ЦИКЛИЗАЦИИ ГОМОВЕРАТИЛАМИНА С ЯНТАРНОЙ КИСЛОТОЙ

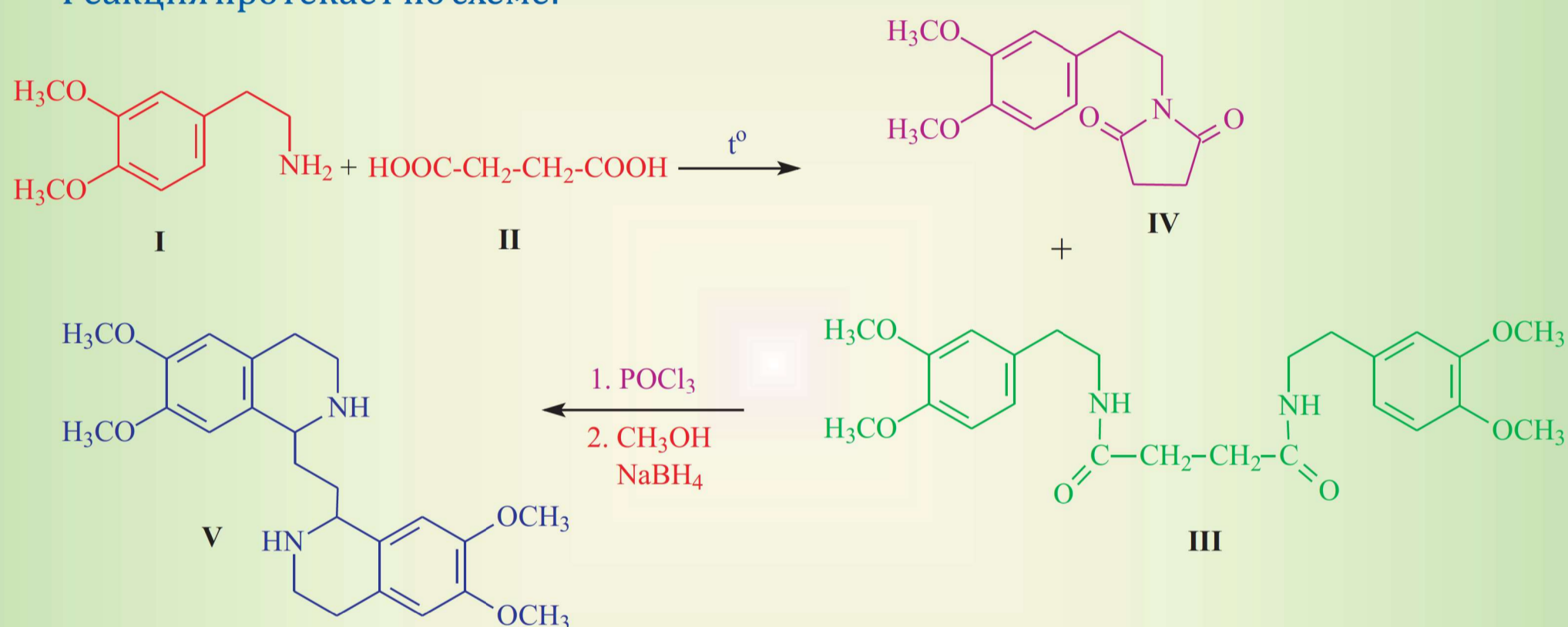
М.Б. Махмудов, А.Ш. Саидов, З. Муртазаева, Н.К. Мухамадиев

Самаркандский государственный университет, Узбекистан. E-mail: m\_nurali55@mail.ru

Изохинолины и их производные входит в состав многих лекарственных препаратов из-за обладания высокой фармакологической активности. В связи с этим синтез производных тетрагидроизохинолинов представляет научно-практический интерес. Успех синтеза таких соединений связан с квантово-химической оценкой хода реакций, что является актуальной с точки зрения планирования и проведения органического синтеза.

Цель - квантово-химическое изучение реакции конденсации и циклизации гомовератиламина с янтарной кислотой.

Реакция протекает по схеме:



Квантово-химические расчеты проводили с помощью программ Gaussian-09 с использованием базисного набора 6-31G\*. По результатам расчетов оценены реакционные центры молекул, распределение плотности электронов вокруг атомов составляющих молекулу, и направление реакции расчетом поверхности потенциальной энергии процесса (на примере образования связей C-N в реакции конденсации и C-C в реакции циклизации), а также энергии активации реакции конденсации и циклизации расчетные значения которых соответственно равны 35,6 и 32,4 кДж/моль. Полученные результаты согласуются с экспериментальными результатами с относительной ошибкой до 5%. Соответствия расчетных и экспериментальных ИК-спектров составляет 97%.

