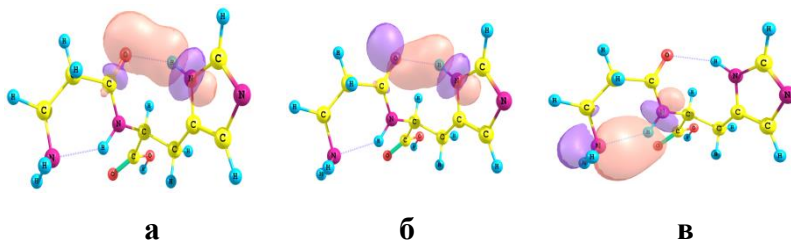


внутримолекулярные водородные связи (NBO-анализ). На данном этапе использован пакет программ Gaussian_03. Оптимизация геометрии молекул, их энергии и частоты колебаний рассчитаны с использованием гибридного функционала B3LYP с базисом 6-31++G**.



Взаимодействие связывающей (LP) и разрыхляющей (BD*) орбитали в молекуле L-карнозина: а – LP1(O)→BD*(NH), б – LP2(O)→BD*(NH), в – LP(N)→BD*(NH)

Установлено, что в молекуле карнозина возможно существование двух водородных связей (см. рисунок). Рассчитана энергия перекрывания E^{HB} и величина перенесенного заряда q_{ct} с орбитали каждой из двух неподеленных электронных пар атома кислорода во фрагменте бета-аланина на разрыхляющую орбиталь NH-связи в имидазольном кольце гистидинового фрагмента дипептида, а также неподеленной электронной пары атома азота во фрагменте бета-аланина на разрыхляющую орбиталь NH-связи гистидинового фрагмента дипептида. Указанные водородные связи стабилизируют структуру молекулы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 12-03-31758мол_а.

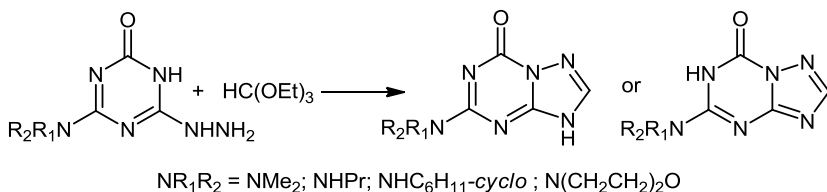
РЕАКЦИЯ МИХАЭЛЯ 1,2,4-ТРИАЗОЛО-1,3,5-ТРИАЗИНОВ С МЕТИЛВИНИЛКЕТОНОМ

Ульянкина И.В., Парфенов В.Е., Бахарев В.В.

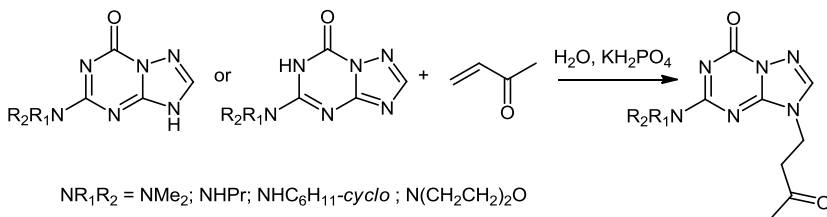
Самарский государственный технический университет
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244

Система 1,2,4-триазоло[1,5-*a*]-1,3,5-триазина является 5-азааналогом пурина и поэтому представляет интерес как базовая структура для дизайна биологически активных соединений. Для синтеза 1,2,4-триазоло[1,5-*a*]-1,3,5-триазинов нами реализован подход, основанный на формировании аннелированного цикла 1,2,4-триазола с использованием гидразинопроводных 1,3,5-триазина и ортомуравьиного эфира [1].

При этом нами были получены продукты, различающиеся положением протона в гетероциклической системе.



Полученные 1,2,4-триазоло[1,5-*a*]-1,3,5-триазины легко вступают в реакцию Михаэля с метилвинилкетонам. Реакция протекает при основном катализе при 20-25°C и завершается за 48 часов.



В результате образуются 3-(3-оксобут-1-ил)-5-алкил(диалкил)амино-3*H*-1,2,4-триазоло[1,5-*a*]-1,3,5-триазин-7-оны с выходом 75-85%. Строение всех продуктов подтверждено данными ИК, ¹H, ¹³C ЯМР спектроскопии и РСА.

1. Bakharev V.V., Parfenov V.E., Ul'yankina I.V. et al. Synthesis of new 5-aza-isosteres of guanine-5-aminosubstituted 1,2,4-triazolo[1,5-*a*]-1,3,5-triazin-7-ones // Tetrahedron. 2014. V. 70, № 38. P. 6825–6830.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках проектной части государственного задания ФГБОУ ВПО «СамГТУ» (проект № 4.813.2014/К).

НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ПРОИЗВОДНЫХ 2,2'-ДИСУЛЬФАНДИИЛБИС(1*H*-ПИРРОЛОВ)

Федосеев С.В., Беликов М.Ю., Григорьева А.О.

Чувашский государственный университет
428015, г. Чебоксары, пр. Московский, д. 15

Производные пиррола занимают важное место в химии биологически активных соединений. Они входят в состав сложных по структуре