

МНОГОСТАДИЙНАЯ ТРЕХКОМПОНЕНТНАЯ ОКСАЛИЛЬНАЯ КОНДЕНСАЦИЯ В СИНТЕЗЕ 3-ИМИНОПРОИЗВОДНЫХ 4,5,6,7-ТЕТРАГИДРОИЗАТИНОВ

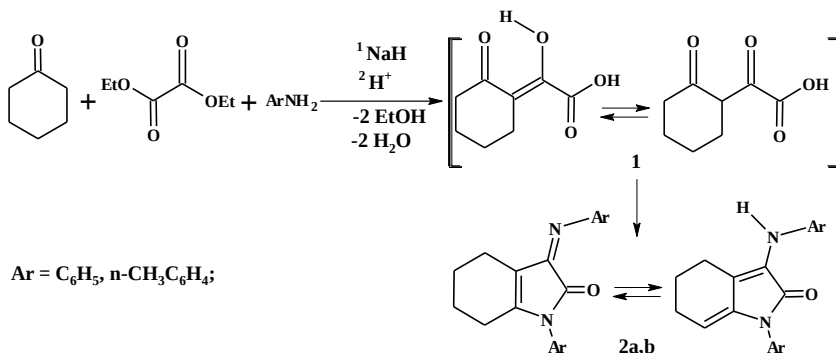
Карманова О.Г.⁽¹⁾, Виноградов А.Н.⁽¹⁾, Козьминых В.О.^(1,2)

⁽¹⁾Оренбургский государственный университет
460018, г. Оренбург, пр. Победы, д. 13, корп. 3
o_karmanova@mail.ru

⁽²⁾Пермский государственный педагогический университет
614051, г. Пермь, ул. Сибирская, 24, kvoncstu@yahoo.com

В настоящее время одним из приоритетных направлений тонкого органического и комбинаторного синтеза является получение конденсированных гетероциклических систем. Интерес к соединениям подобного типа обусловлен широким спектром проявляемых свойств. Поиск новых методов синтеза, включающих наиболее удобные и препаративные способы синтеза, является актуальным в химии гетероциклических соединений.

На основе 2-кетоциклогексилглиоксиловой кислоты (1), получаемой в результате оксалильной конденсации Клайзена в условиях основного катализа нами осуществлен синтез имино-оксиндольных производных – N-арил-3-(арилимино)-4,5,6,7-тетрагидроизаатинов (2a,b).



Препаративность и простота предлагаемого метода, заключающегося в трехкомпонентной многостадийной конденсации циклогексанона с диэтилоксалатом и ароматическим амином, делают очевидным его применение в синтезе конденсированных гетероциклических систем данного типа.

Химическая индивидуальность целевых соединений 2a,b – имино-оксиндольных производных тетрагидроизаатина, установлена на основании данных ИК и ЯМР¹H спектроскопии.

Работа выполнена в рамках проекта №1.3.09 «Синтез и исследование свойств высокоспиновых фрустрированных молекулярных магнетиков» Федерального агентства по образованию РФ на 2009 – 2010 гг.

ВЗАИМОСВЯЗЬ МЕЖДУ ЭНЕРГИЯМИ И ДЛИНАМИ СВЯЗЕЙ ОТДЕЛЬНЫХ ВИДОВ

Папулова Д.Р.

Тверской государственный университет

170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33

Между энергией связи ϵ и ее длиной (межъядерным расстоянием) r существует некоторая функциональная зависимость $\epsilon = f(r)$ и в первом приближении эта зависимость линейная. Действительно, разлагая функцию $f(r)$ в ряд Тэйлора,

$$f(r) = f(r_0) + \{(r-r_0)/1!\}(df/dr)_{r=r_0} + \{(r-r_0)^2/2!\}(d^2f/dr^2)_{r=r_0} + \dots$$

и ограничиваясь первыми двумя членами разложения, найдем $\epsilon = \alpha + \beta r$, где α и β – постоянные. Эта зависимость может быть использована для расчета энергий связей отдельных видов.

При учете ближайшего окружения связи C-C в алканах распадаются на 10 видов C_i-C_j ($i, j = 1, 2, 3, 4; i \leq j$), а связи C-H (без метана) – на 3 вида C_i-H ($i = 1, 2, 3$). Для энергии образования алканов мы получаем схему Татевского (см. [1]):

$$E_{C_n H_{2n+2}} = \sum_{i,j=1; i \leq j}^4 n_{ij} \epsilon_{C_i-C_j} + \sum_{i=1}^3 n_i \epsilon_{C_i-H} \quad (1)$$

(n_{ij} и n_i – числа связей отдельных видов). Выражение (1) можно привести к виду

$$E_{C_n H_{2n+2}} = \sum_{i,j=1; i \leq j}^4 n_{ij} E_{ij}, \quad (2)$$

где

$$E_{ij} = \epsilon_{C_i-C_j} + [(4-i)/i]\epsilon_{C_i-H} + [(4-j)/j]\epsilon_{C_j-H}. \quad (3)$$

Величины E_{ij} определяются из (2). Однако энергии связей отдельных видов из (3) нельзя определить, поскольку число уравнений (их 10) меньше числа неизвестных (13). Кроме того, величины $\epsilon_{C_i-C_j}$ и ϵ_{C_i-H} в выражении (3) являются линейно зависимыми. Через энергии образования (энтальпии атомизации) молекул можно определить лишь определенные комбинации этих величин (т.е. E_{ij}), но не сами величины в от-