

можно выделить из реакционной смеси, при этом выход циклопропана напрямую зависит от используемого в качестве растворителя спирта. Использование наиболее активного метилового спирта дает наименьший выход циклопропана, но при этом ускоряется процесс образования конечного соединения **3**.

1. Яшканова О.В., Насакин О.Е., Урман Я.Г., Хрусталеv В.Н., Нестеров В.Н., Антипин М.Ю., Лукин П.М., Вершинин Е.В. // *ЖОрХ*. **1997**, 542.

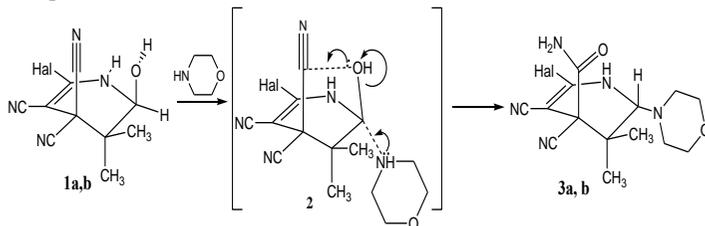
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 2-ГАЛОГЕН-6-ГИДРОКСИ-5,5-ДИМЕТИЛ-5,6-ДИГИДРО-1*H*-ПИРИДИН-3,4,4-ТРИКАРБОНИТРИЛОВ С МОРФОЛИНОМ

Липин К.В., Еремкин А.В., Еришов О.В., Каюков Я.С.

Чувашский государственный университет, Чебоксары

Проведенные нами экспериментальные исследования взаимодействия 2-галоген-6-гидрокси-5,5-диметил-5,6-дигидро-1*H*-пиридин-3,4,4-трикарбонитрилов с морфолином показали, что в зависимости от условий проведения реакции может варьироваться глубина превращения. Как мы считаем, это обусловлено наличием у морфолина кроме нуклеофильных еще и основных свойств.

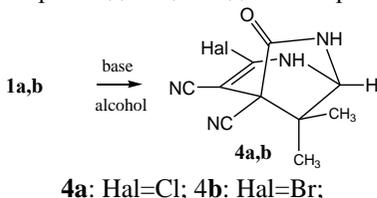
Нами было обнаружено, что существенное влияние на направление реакции, оказывает природа растворителя. Так в апротонном растворителе (ацетон, ацетонитрил) наблюдается 1,3-диаксиальное содействие цианогруппы нуклеофильному замещению гидроксила в результате чего образуются 3,3-диметил-6-галоген-2-морфолин-4-ил-4,5-дициано-1,2,3,4-тетрагидропиридин-4-карбоксамиды (**3a,b**) с выходом 78-87%. При этом входящий морфолиновый остаток располагается по данным РСА в транс положении к карбоксамиду, что является дополнительным свидетельством в пользу протекания процесса замещения и гидролиза tandemно.



3a: Hal=Cl; **3b:** Hal=Br;

В отличие от полярного апротонного растворителя (ацетонитрила или ацетона), используемого для синтеза карбоксамидов **3**, в амфипро-

тонном растворителе, таком как метанол или этиловый спирт, реакция не заканчивается на образовании соединений **3**, а претерпевает дальнейшее превращение, сопровождающееся дезаминированием.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №08-03-97015 л-Поволжье-а). Авторы выражают благодарность Центру коллективного пользования Чувашской республики в области нанотехнологий за исследование ИК и масс-спектров.

СВЯЗЬ ЧАСТОТ ВАЛЕНТНЫХ КОЛЕБАНИЙ С ТОПОЛОГИЧЕСКИМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ

Локтев А.И., Барташевич Е.В.

Челябинский государственный университет

Прямая колебательная задача является сложной и комплексной, в которой невозможно учесть все влияния на колебательный процесс, и расчетное значение частоты может существенно отличаться от экспериментального.

В данной работе исследована зависимость между значениями частот поглощения в экспериментальных ИК-спектрах веществ в газовой фазе и топологическими характеристиками электронной плотности (ЭП) в критических точках (КТ) связей [1]. Для исследования были взяты моно- и полифункциональные ароматические соединения. В качестве функциональных групп, колебания которых подвергались оценке, выбраны группы, содержащие связи типа Н-Х и группы, способные образовывать с последними водородные связи. Для молекул данной выборки характерно как наличие внутримолекулярных связей, так и их отсутствие.

Оптимизация геометрии молекул проводилась полуэмпирическим методом PM3, затем был произведен топологический анализ электронной плотности $\rho(r)$ и лапласиана $\nabla^2\rho(r)$ (DFT, B3LYP, 6-311 (d,p)) в рамках программного пакета AIMPACK [2]. В ходе регрессионного анализа между частотами колебаний и характеристиками ЭП, в том числе кривизной связи в трех ортогональных направлениях λ_1 , λ_2 , λ_3 (соб-