

щью расчетов кластера не отличаются от результатов, полученных в димерном приближении.

1. J.H.Williams, J.K.Cockcroft, A.N.Fitch //Angew. Chem., Int. Ed. Engl. 1992, 31, 1655-1657.
2. Бейдер Р. Атомы в молекулах: квантовая теория. Пер. с англ. М.:Мир, 2001, 532с.

## СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ (ТИО)СЕМИКАРБАЗОНОВ ЗАМЕЩЕННЫХ 6-ОКСОЦИКЛОГЕКСАН-1,3-ДИКАРБОКСИЛАТОВ

Поллевина Н.В., <sup>1</sup>Щелочкова О.А., Сыщикова А.А.

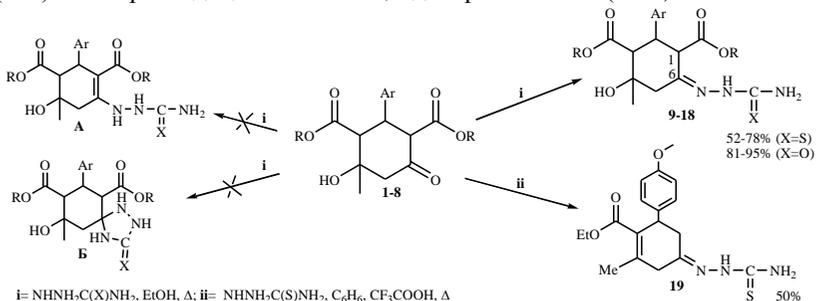
Саратовский государственный университет

<sup>1</sup>Саратовский государственный медицинский университет

Замещенные 6-оксоциклогексан-1,3-дикарбоксилаты как поликарбонильные соединения перспективны в плане построения на их основе новых карбо- и гетероциклических соединений, в том числе и практически значимых.

Ранее при изучении реакций указанных соединений с азотсодержащими полинуклеофильными реагентами были получены продукты замещения карбонильной группы алицикла: енамины, спираны, оксимы. В реакциях с тиосемикарбазидом [1] предполагалось существование продуктов в форме тиосемикарбазонов и азаспиранов (ИК, ЯМР <sup>1</sup>H).

В настоящей работе представлены данные по изучению взаимодействия диалкил-4-гидрокси-4-метил-6-оксоциклогексан-1,3-дикарбоксилатов **1-8** с семикарбазидом и тиосемикарбазидом (субстрат:реагент=1:1,5, кипячение в этаноле). При этом с хорошими выходами были получены диалкил-2-арил-4-гидрокси-4-метил-6-(тио)семикарбазидоциклогексан-1,3-дикарбоксилаты (**9-18**).



i= NHNH<sub>2</sub>C(X)NH<sub>2</sub>, EtOH, Δ; ii= NHNH<sub>2</sub>C(S)NH<sub>2</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, CF<sub>3</sub>COOH, Δ

Ar=Ph (**1,2,9,10,15**), 4-OMeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**3,4,11,12,16**), 3,4-(OMe)<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub> (**5,6,13,14**), 3-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**7,17**), Th (**8,18**);  
R=Et (**1,3,5,7,8,9,11,13,15-18**), Me (**2,4,6,10,12,14**); X=S (**9-14**), O (**15-18**)

Отсутствие в ИК спектрах последних валентных колебаний сопряженной карбонильной группы, наличие в спектрах ЯМР <sup>1</sup>H сигнала про-

тона  $H^1$ , присутствие 10 сигналов  $sp^3$  гибридных атомов углерода в спектре ЯМР  $^{13}C$ , данные РСТА подтверждают строение (тио)семикарбазонов в растворе ( $CDCl_3$ ) и в кристаллическом состоянии и исключают возможные альтернативные структуры **A** и **Б**.

В более жестких условиях (кипячение реагентов в бензоле в присутствии  $CF_3COOH$ ) продукт гетероциклизации также не образуется, а реакция неожиданно протекает как нуклеофильное замещение, дегидратация, декарбоксилирование и приводит к образованию семикарбазона циклогексенкарбоксилата **19**.

1. Зорина А.А., Носова Н.Н., Владимиров И.В. и др. // Фармация и здоровье: материалы междунар. науч.-практ. конф. Пермь. 2005. С. 64.

## ОСОБЕННОСТИ РАЗЛОЖЕНИЯ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ ОРГАНИЧЕСКОЙ МАССЫ УГЛЯ

*Пятыгина М.В.*

Исследовательский центр проблем энергетики КазНЦ РАН, Казань

Традиционное сжигание угля не позволяет полностью использовать его теплотворную способность, альтернативой этого процесса является получение пиролизного и генераторного газов. Зная строение соединений, входящих в состав угля, химизм реакций, протекающих при термохимическом разложении угля с участием данных соединений, и механизм процесса пиролиза можно определить вероятность получения из этих соединений целевых продуктов (метан, этан и т.д.).

Проектирование технологических схем для применения на электростанциях требует предварительной оценки энергетических затрат на проведение процесса, что возможно при конкретизации процессов, протекающих с поглощением энергии, т.е. путей и химических реакций разложения органической массы угля. Детальное изучение энергетических вкладов реакций по группам соединений (кислородсодержащие, азотсодержащие, серосодержащие) [1] и влияние этих соединений на образование целевых продуктов позволит определить технологические режимы проведения процессов.

При изучении вероятности протекания реакций в прямом направлении, ведущем к образованию продуктов пиролиза, в том числе, и целевых, и на основе расчетов термодинамических параметров реакций (энтальпии, энтропии, энергии Гиббса) с использованием аддитивной методики [2], были сделаны следующие выводы.

Такие соединения как бензойные кислоты и их алкилпроизводные могут разлагаться соответственно до бензола и алкилароматических углеводородов при температуре 300-550°C, образовавшиеся производные