

Список литературы

1. *Fazullin D. D., Mavrin G. V., Sokolov M. P.* // American Journal of Environmental Sciences. 2014. Vol. 10, № 5. P. 424–430.
2. *Fazullin D. D., Mavrin, G. V., Shaikhiev, I. G. et al.* // Petroleum Chemistry. 2016. Vol. 56, № 5. P. 454–458.
3. *Fazullin D. D., Fazylova R. D., Fazullina L. I. et al.* // Journal of Physics: Conference Series. 2019. № 1347. P. 012035.

* Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (МК-1107.2019.8).

УДК 547.785.1

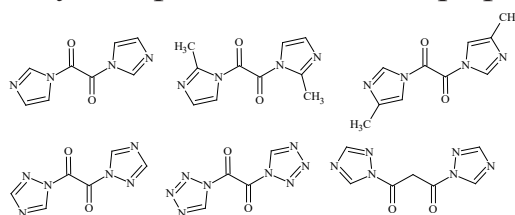
В. Д. Федотова, М. В. Евстегнеева, Ю. П. Зарубин, П. П. Пурыгин

Самарский национальный исследовательский
университет им. С. П. Королева,
Естественнонаучный институт,
кафедра неорганической химии,
443086, Россия, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34,
puruginpp2002@mail.ru

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ АЗОЛИДОВ ДИКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С НУКЛЕОФИЛЬНЫМИ И ЭЛЕКТРОФИЛЬНЫМИ АГЕНТАМИ

Ключевые слова: дикарбоновые кислоты, азолиды, синтез, реакционная способность, прогнозирование.

Методами молекулярной механики и квантовой химии проведены исследования реакционной способности наиболее устойчивых конформаций молекул 1,1'-оксалилди(имидазола) [1], 1,1'-оксалилди(2-метилимидазола), 1,1'-оксалилди(4-метилимидазола) [2], 1,1'-оксалилди(1,2,4-триазола) [3], 1,1'-оксалилди(тетразола) [3], 1,1'-малонилди(1,2,4-триазола) [4] и ряда других при их взаимодействии с нуклеофильными и электрофильными агентами.



Структуры молекул исследуемых соединений были созданы в программе SCIGRESS 3.1.4, наиболее устойчивые конформации молекул были рассчитаны в программе Spartan'10 1.1.0 с использованием молекулярно-механического силового поля MMFF. Расчет поверхностей нуклеофильной и электрофильной восприимчивостей молекул азолидов дикарбоновых кислот проводился в программе SCIGRESS 3.1.4 с использованием метода DGauss DFT B88-PW91.

Взаимная ориентация C=O-групп характеризуется значениями торсионного угла O–C–C'–O' в области $\pm 90^\circ$, что связано со взаимным электростатическим отталкиванием атомов кислорода карбонильных групп и стерическими препятствиями, создаваемыми азольными фрагментами, не позволяющими сделать значения торсионного угла O–C–C'–O' близкими к $\pm 180^\circ$.

На рис. 1 и 2 в качестве примера приведены результаты расчетов поверхностей нуклеофильной и электрофильной восприимчивости для молекул азолидов щавелевой и малоновой кислот.

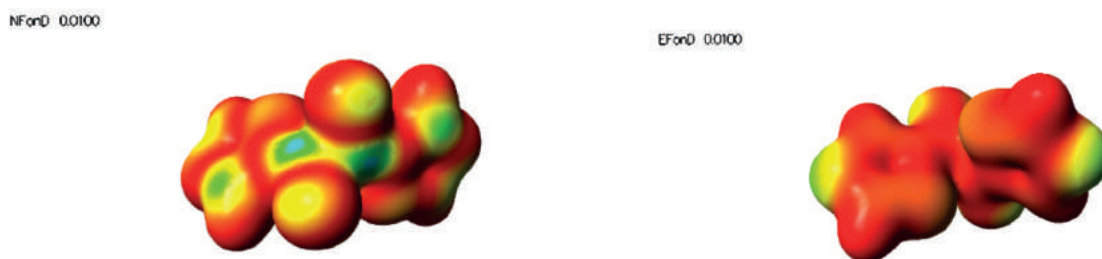


Рисунок 1. Поверхности нуклеофильной и электрофильной восприимчивости для молекул 1,1'-оксалилди(1,2,4-триазола)

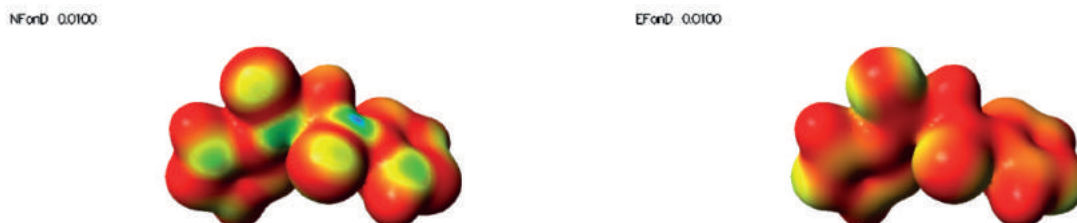


Рисунок 2. Поверхности нуклеофильной и электрофильной восприимчивости для молекул 1,1'-малонилди(1,2,4-триазола)

Центрами нуклеофильной восприимчивости являются атомы углерода карбонильных групп (голубой цвет), которые легко участвуют во взаимодействиях с различными *N*-, *O*- и *S*-содержащими нуклеофилами, давая соответствующие производные дикарбоновых кислот [3]. Центрами электрофильной восприимчивости являются атомы азота N³ или N⁴ с неподеленными электронными парами в азольных фрагментах (зеленый и желто-зеленый цвета), которые могут вступать во взаимодействие с различными электрофилами, в частности с алкилгалогенидами [5]. Это делает азолиды дикарбоновых кислот перспективными реагентами в синтезе различных классов производных органических и природных соединений.

Список литературы

1. Пурьгин П. П., Алексеев В. Ю., Алексеев И. Н. и др. // Бутлеровские сообщения. 2018. Т. 54, № 6. С. 111–115.
2. Пурьгин П. П., Шаргало А. В., Милютин К. В. и др. // Бутлеровские сообщения. 2019. Т. 59, № 7. С. 122–127.
3. Staab H. A., Bauer H., Schneider K. M. Azolides in Organic Synthesis and Biochemistry. 2002. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. 502 p.
4. Пурьгин П. П., Евстегнеева М. В., Шафигулин Р. В., Зарубин Ю. П. // Бутлеровские сообщения. 2019. Т. 57, № 1. С. 41–49.
5. Aiad I., Emam D., El-Deeb A. et al. // J. Surfact. Deterg. 2013. Vol. 16. P. 927–935.

УДК 547.1-304.2:547.1-32-304.2

С. М. Филатова, Т. Г. Бодрова, М. К. Гусева, Ю. Л. Себякин

*МИРЭА – Российский технологический университет,
119571, Россия, г. Москва, пр. Вернадского, 86,
c-221@yandex.ru*

КАТИОННЫЕ ДИАЛКИЛ-АМФИФИЛЫ НА ОСНОВЕ ДИЭТАНОЛАМИНА В ГИДРОФОБНОМ БЛОКЕ*

Ключевые слова: антибактериальные амфифилы, диэтаноламин, производные аминокислот.

Разработка и внедрение новых антибактериальных препаратов является актуальным вопросом в связи с развитием резистентности бактерий к известным антибиотикам. Главной задачей химиков является синтез низкомолекулярных пептидных агентов, обладающих низкой токсичностью и высокой эффективностью.

Известно, что соединения, имеющие в своей структуре катионную часть, где в качестве катиона выступает замещенный атом азота, а гидрофобные хвосты представлены цепочкой из 6–14 углеродных атомов, обладают хорошей антибактериальной активностью.

Целью данной работы является синтез новых соединений на основе диэтанолamina, содержащих нейтральные алифатические и ароматические аминокислоты, для изучения связи структура – биологические свойства.

Схема синтеза включала в себя получение гидрофобной части путем образования простой или сложноэфирной связи между гидроксильными группами Вос-замещенного диэтанолamina и алкилбромидами или алифатическими карбоновыми кислотами соответственно. Затем после удаления