

Химические науки

**ИЗУЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МОЛЕКУЛ
N-АРИЛЗАМЕЩЕННЫХ
ПИРРОЛИН-2-ОНОВ С ПОМОЩЬЮ
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ**

Бурлака С.Д., Музыченко Г.Ф., Иваненко М.М.,
Пахомов М.Е.

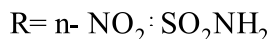
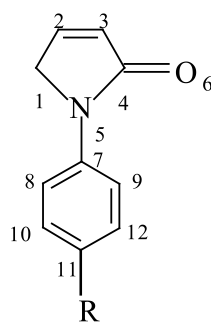
Кубанский государственный технологический
университет, Краснодар,
e-mail: meriru@rambler.ru

Исходя из структуры пирролинонов, следует ожидать возможность протекания реакций по нескольким реакционным центрам, а синтетические возможности этих соединений не исчерпаны [1– 4]. N-замещенные производные пирролидонов обладают рострегулирующей и антистрессовой активностью [5]. На современном этапе развития органического синтеза широко используются квантово-химические методы расчетов параметров органических молекул для предопределения их реакционной способности. Проведенные исследования показывают высокую реакционную способность N-арилзамещенных пирролин-2-онов в реакциях присоединения по двойной связи пирролинового кольца, в реакциях радикального, нуклеофильного присоединения, что уже подтверждено экспериментальными данными [6,7]. Исследование структуры 1-(4-R-фенил)пирролинона проведено методом дипольных моментов и квантово-химический расчетом по методу MNDO.

Рассчитанный дипольный момент молекулы пирролинона оказался выше экспериментального. Различия в рассчитанном и экспериментальном дипольном моменте связаны с тем, что при расчетах не было учтено нарушение компланарности молекулы. Полученные расчеты показали, что атом азота принимает участие в сопряжении не только с R-фенильным фрагментом, но и с атомом кислорода карбонильной группы. Сравнение величин зарядов на атомах углерода пирролиноновых циклов молекул исследуемых пирролин-2-онов (таблица) показывает незначительное влияние на них заместителя в p- положении бензольного кольца.

Список литературы

- Музыченко Г.Ф., Бурлака С.Д., Заводник В.Е., Глуховцев В.Г., Кульневич В.Г., Зимина М.А. Синтез и реакционная способность N-арилзамещенных пирролинонов // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. – 1999. – Т. 42; № 4. – С. 34–45.
- Бурлака С.Д. Синтез и реакционная способность N-арилзамещенных пирролин-2-онов. Диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук / Кубанский государственный технологический университет. – Краснодар, 2000.
- Сибирякова М.А., Бурлака С.Д., Музыченко Г.Ф. Синтез 1-(4-нитрофенил)-N-алкиламинопирролидонов // Современные проблемы теоретической и экспериментальной химии: 2-я Всероссийская конференция молодых ученых. – Саратов, 1999. – С. 67–68.
- Зимина М.А. Бурлака С.Д., Пушкарева К.С. Исследование строения 1-(4-нитрофенил)-5H-пирролинона // Проблемы теоретической и экспериментальной химии. – Екатеринбург, 1997. – С.134.
- Бурлака С.Д., Музыченко Г.Ф., Глуховцев В.Г., Нишкин Г.И., Кульневич В.Г., Пушкарева К.С., Зимина М.А. Реакции радикального присоединения спиртов к 1-(4-



R	Заряд атома				
	C(1)	C(2)	C(3)	C(4)	N(5)
NO ₂	0,175	-0,069	-0,109	0,387	-0,398
SO ₂ NH ₂	-0,023	-0,135	-0,195	0,334	-0,300

нитрофенил)-5н-пирролинону // Химия гетероциклических соединений. – 1998. – № 7. – С. 934–938.

6. Сибирякова М.А., Музыкаченко Г.Ф., Бурлака С.Д., Тюхтенева З.И. Реакции нуклеофильного присоединения аминов к N-арилзамещенным пирролин-2-онам // Химия гетероциклических соединений. – 2002. – №5. – С. 619–622.

7. Музыкаченко Г.Ф., Ненько Н.И., Бурлака С.Д., Сибирякова М.А., Копань А.С. Эффективность новых производных 4-N-X-аминопирролидонов-2, обладающих рострегулирующей и антистрессовой активностью // Агрехимия. – 2005. – № 5. – С. 71–75.

АНАЛИЗ РЕАКЦИИ НУКЛЕОФИЛЬНОГО ПРИСОЕДИНЕНИЯ БЕНЗИЛАМИНА К 1-(4-R-ФЕНИЛ)5Н-ПИРРОЛИН-2-ОНАМ

Бурлака С.Д., Музыкаченко Г.Ф., Титов Д.М.

Кубанский государственный технологический университет, Краснодар, e-mail: meriru@rambler.ru

Особо актуальным является целенаправленный синтез N-замещенных пирролидонов-2, амидов аминокбутановой кислоты и N-замещенных-5-R-бензилпирролин-2-онов, которые могут обладать биологической активностью. Ранее получены N-замещенные амиды аминокислоты, проявившие фунгицидную активность, акарицидное, антимикробное действие и фениламинопирролидон-2 с противовоспалительной и рострегулирующей активностью [1–6].

Вероятно, реакция начинается с атаки амина за счет неподеленной электронной пары атома азота по атому углерода двойной связи более удаленному от С=О группы с одновременным выбросом протона, в результате чего образуется резонансно стабилизированная структура 1 а,б (схема), которая присоединяет не успевший диффундировать в реакционную среду протон. Реакция протекает через стадию образования 1-(4-R-фенил)-4-N-алкилпирролидона-2, который первоначально накапливается и далее, постепенно расходуясь, превращается в N-замещенный амид 4-(4-R-фенил)аминобутановой кислоты, что подтверждается методом тонкослойной хроматографии. Установлено значение константы скорости – 0,398 и дробный порядок реакции равный 0,57, что свидетельствует о протекании реакции через промежуточную лимитирующую стадию, то есть является подтверждением предлагаемого механизма протекания процесса через стадию образования пирролидона. Скорость реакции определяли графическим дифференцированием кинетической кривой путем построения касательных в различных точках, порядок реакции находили по угловому коэффициенту наклона построенной прямой.

