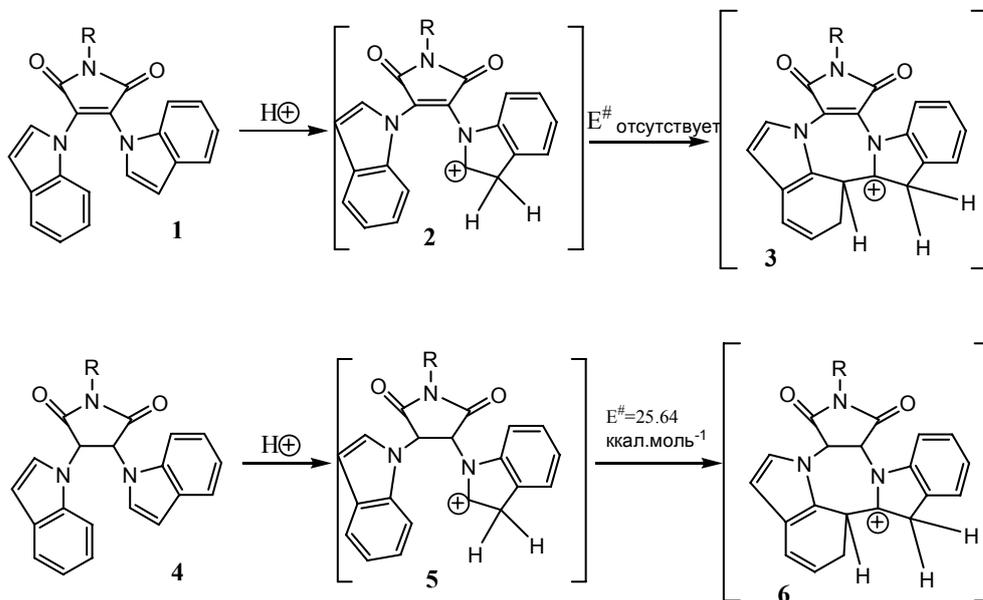


## КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ТРАНСФОРМАЦИИ 2,3-БИС-ИНДОЛИЛМАЛЕИНИМИДОВ И 2,3-БИС-ИНДОЛИЛСУКЦИНИМИДОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПРОТОННЫХ КИСЛОТ.

Е.Е.Быков, С.А.Лакатош, М.Н.Преображенская.

ГУ НИИ по изысканию новых антибиотиков имени Г.Ф.Гаузе РАМН, Москва,  
119021, Б.Пироговская 11 Факс: +7(495)245-0296 E-mail: mnp@space.ru

Исследованы реакции внутримолекулярной циклизации 2,3-бис-индолилмалеинимидов **1** и 2,3-бис-индолилсукцинимидов **4** под действием протонных кислот с целью количественной оценки параметров взаимодействия протонированных и непротонированных индольных фрагментов интермедиатов **2** и **5**. В ходе квантовохимических расчётов методом функционала плотности B3LYP в базисе 6-31G(d) показано, что циклизации **2** и **5** резко отличаются по энергетике. В то время как циклизация **2** происходит безбарьерно, что подтверждено расчётами и экспериментом<sup>1</sup>, активационный барьер циклизации **5** составляет 25.64 ккал.моль<sup>-1</sup>. Можно предположить, что, как и было установлено в работах для **2**<sup>1,2</sup>, это различие обусловлено геометрическими параметрами активированного комплекса (угол подхода внутреннего электрофила к внутреннему нуклеофилу и расстояние между реакционными центрами), так как при переходе от малеинимидного цикла к сукцинимидному изменяется гибридизация сопряжённых с индольными циклами атомов углерода.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 06-03-32233 и гранта Евроконсорциума «PROTEIN KINASES – NOVEL DRUG TARGETS OF POST GENOMIC ERA»

1. Е.Е.Быков, С.А.Лакатош, М.Н.Преображенская, «Известия Академии наук. Серия химическая» 2006, 5, 754-760.

2. Е.Е.Быков, С.А.Лакатош, М.Н.Преображенская, «Известия Академии наук. Серия химическая» 2006, 12, 2069-2073.