

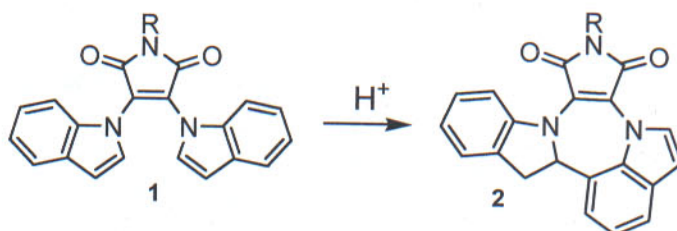
# Изучение направления циклизации 3,4-дииндолилмалеимидов с заместителями в индольном ядре от характера и положения заместителей

А. Ю. Симонов, С. А. Лакатош, Е. Е. Быков, М. Н. Преображенская\*

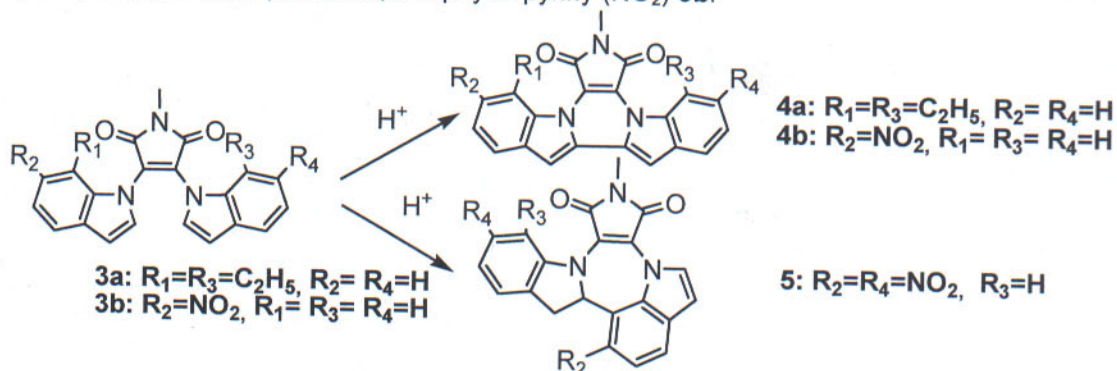
ГУ Научно-исследовательский институт по изысканию новых антибиотиков им.Г.Ф. Гаузе, РАМН, Россия, Москва 110992, ул.Б.Пироговская д.11, т.245-3753, e-mail [mnp@space.ru](mailto:mnp@space.ru)

Ключевые слова: циклизация, бис(индол-1-ил)малеимиды, diazepины[1,4].

Бис(индол-1-ил)малеимидов **1** под действием протонных кислот циклизуются в производные diazepина[1,4] **2** [1].



Изучена возможность циклизации 3,4-ди(индол-1-ил)малеимидов, содержащих в индольном ядре различные заместители по направлениям 2,2' и 2,7'. Были получены производные, содержащие заместитель, блокирующий реакционный центр в седьмом положении индольного ядра (этил) **3a**, или электроноакцепторную группу (NO<sub>2</sub>) **3b**.



Предварительно проведенные расчеты полуэмпирическим, квантово-химическим методом AM1 показали, что активационный барьер ( $E^{\ddagger}=23,20$  ккал/моль) циклизации 2-2' для **3a** выше, чем для **1** ( $E^{\ddagger}=15,97$  ккал/моль). Предположительно из-за ван-дер-ваальсовых взаимодействий этильных групп с атомами кислорода maleимидного фрагмента в молекуле **3a**, затрудняющими вращение индольных циклов вокруг оси C-N, которое создает условия для циклизации.

При расчете структуры **3b** методом функционала плотности B3LYP/6-31G(d), в случае протонирования в незамещенное индольное ядро возникает нестабильность решения, что по видимому сводит на нет возможность циклизации по направлению 2-7', соединение **5**. Однако, при расчете в том же базисе циклизации **3b** по направлению 2-2', активационный барьер ( $E^{\ddagger}=11,83$  ккал/моль) можно считать вполне адекватным для протекания этого процесса в мягких условиях с образованием **4b**. При расчете циклизации **3b**, протонированного в индольное ядро замещенное NO<sub>2</sub>-группой наблюдается противоположная картина, с предпочтительным образованием соединения **5**.

Работа выполняется при поддержке гранта РФФИ № 06-03-32233

Литература:

1. S.A. Lakatosh, Y.N. Luzhikov, M.N. Preobrazhenskaya // Org. Biomol. Chem. – 2003. – V. 1. - P. 826-833.