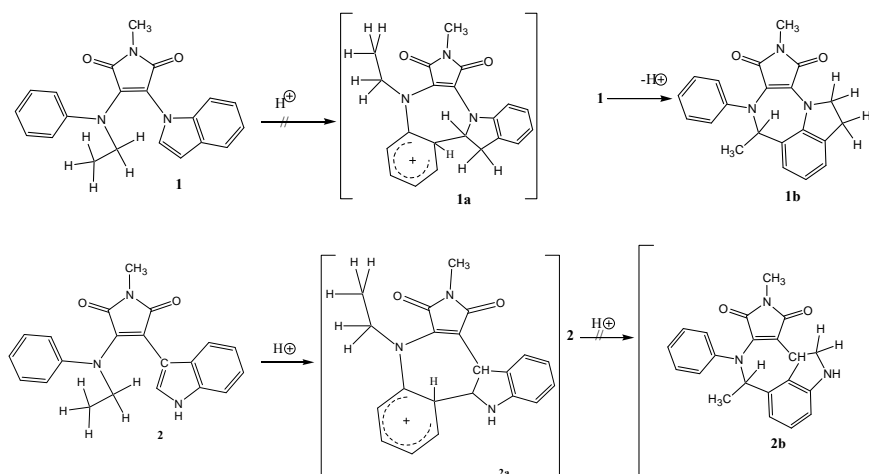


Квантово-химическое изучение механизмов трансформации 1-метил-3-(N-алкиламино)-4-(индол-1-ил)- и 1-метил-3-(N-алкиламино)-4-(индол-3-ил)-малеинимида под действием протонных кислот .

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

ГУ НИИ по изысканию новых антибиотиков им. Г.Ф.Гаузе РАМН Москва, 119021  
Б.Пироговская 11. Факс: (495)245-0296. <http://www.gause-inst.ru> E-mail: [nnp@space.ru](mailto:nnp@space.ru)

Трансформация 1-метил-3-(N-алкиламино)-4-(индол-1-ил)-малеинимида **1** и 1-метил-3-(N-алкиламино)-4-(индол-3-ил)-малеинимида **2** (схема1) под действием протонных кислот протекают различно и приводят к соединениям разного типа<sup>1</sup>.  
Схема1



Квантово-химические расчёты структур ключевых интермедиатов и переходных состояний вышеупомянутых реакций, проведённые по методу функционала плотности B3LYP/6-31G(d), показывают, что активационный барьер гипотетической циклизации по фенильному кольцу  $1 \rightarrow 1a$  ( $\Delta E^\ddagger = 22.93$  ккал.моль<sup>-1</sup>), значительно выше барьера циклизации  $1 \rightarrow 1b$  с гидридным переносом от метиленовой группы этиланилинового фрагмента соединения **1**, наблюдаемой в эксперименте ( $\Delta E^\ddagger = 3.29$  ккал.моль<sup>-1</sup>). Соответственно, энергия активации реакции  $2 \rightarrow 2a$  ( $\Delta E^\ddagger = 13.09$  ккал.моль<sup>-1</sup>) ниже таковой для гипотетической циклизации структуры **2** в индолиновое производное **2b**, включающей гидридный сдвиг ( $\Delta E^\ddagger = 38.29$  ккал.моль<sup>-1</sup>). Расчёты, так же как и в работе<sup>2</sup>, подтверждают предположение о различных механизмах протекания данных реакций.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 06-03-32233)

#### Список литературы

1. S.A. Lakatosh, Y.N. Luzikov, and M.N. Preobrazhenskaya, Tetrahedron. 2005, **61**, 2017-2020
2. Е.Е.Быков, С.А.Лакатош, М.Н.Преображенская, «Известия Академии наук. Серия химическая» 2006, **5**, 754-760 .

