

АКАДЕМИЯ НАУК ЛАТВИЙСКОЙ ССР  
ИНСТИТУТ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

**СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ  
БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ**

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ  
7-й КОНФЕРЕНЦИИ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

РИГА „ЗИНАТНЕ“ 1981

Т.Ф.Пахурова

Рижский политехнический институт

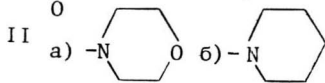
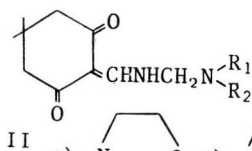
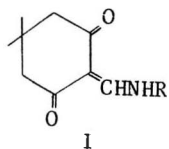
#### СИНТЕЗ И СВОЙСТВА 2-N-ЗАМЕЩЕННЫХ АМИНОМЕТИЛЕНДИМЕДОНОВ

N-Замещенные аминометилен-1,3-циклогександионы, полученные из соответствующих 2-ацилпроизводных, обнаруживают гербицидную, нематоцидную, инсектицидную активность, действуют на центральную нервную систему, проявляют антивирусную активность. Некоторые из них нашли применение в сельском хозяйстве и медицине. Данных о соответствующих производных, получаемых на основе 2-формил-1,3-циклогександионов, нет.

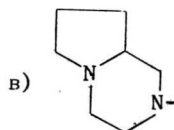
Благодаря разработке удобного метода получения 2-формил-1,3-циклогександионов открываются возможности синтеза самих N-замещенных аминометиленпроизводных.

Нами изучены реакции 2-формилдимедона с различными N-нуклеофилами с целью сравнения биологической активности N-замещенных аминометиленпроизводных и соединений этого ряда, из-

вестных в литературе. Мы получили 2-N-аминометиленимидоны строения I:



R<sub>1</sub>R<sub>2</sub>N:



R=H, алкил, арил, гетерил,  
α, β, γ-оксикарбонилалкил

По химическому строению их можно отнести как к β-аминовинилкетонам, так и к виниловым аналогам карбоновых кислот. В качестве β-аминовинилкетонов они претерпевают реакцию перереаминарования. Как виниланалог карбоновой кислоты (R=H) подвергается окси- и аминотилированию с образованием соответствующих 2-N-(N'-алкиламино)метиламинометиленимидонов (IIa-в).

Полученные соединения обладают биологической активностью, некоторые из них проявляют нейротропное действие.

Г.Г.Пукитис

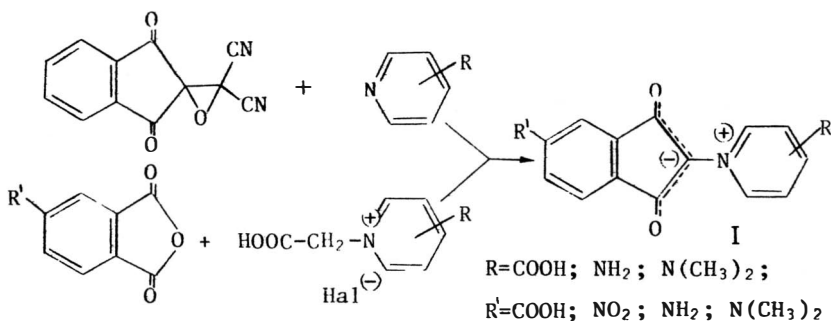
Рижский политехнический институт

### СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ БЕТАИНА 2-(N-ПИРИДИНИЙ)-1,3-ИНДАНДИОНА

Среди производных 1,3-индандиона известны многие соединения, обладающие биологической активностью и используемые в медицине, в том числе α-, β- и γ-пирофталоны. Это побудило

исследователей к синтезу потенциально биологически активных замещенных 2-N-пиридиновых производных 1,3-индандиона.

Для получения этих соединений наиболее перспективными представляются пути их синтеза посредством взаимодействия окиси 2-дицианометилен-1,3-индандиона с пиридином или его производными либо реакцией ангидридов замещенных фталевых кислот с солями N-пиридинийзамещенных уксусных кислот:



Синтезирован ряд производных бетаина 2-(N-пиридиний)-1,3-индандиона (I) варьированием различных заместителей во фталольном и пиридиновом кольцах.

Полученные соединения — желтые, оранжевые и красные вещества. Их ИК-, УФ- и ПМР-спектры подтверждают структуру внутренних солей. В УФ-спектре выделяется длинноволновая полоса внутримолекулярного переноса заряда с анионного фрагмента молекулы на катионный.

Указанные соединения являются сильными электронодонорами. Об этом свидетельствуют рассчитанные по способу спектроскопии комплексов с переносом заряда (КПЗ) потенциалы ионизации (IP), которые понижаются при введении в молекулу электронодонорных заместителей. В случае  $R = \text{N}(\text{CH}_3)_2$  рассчитанный IP равен 6,9 эВ,

он сравним с IP такого электронодонора, как тетрацен. Соединения (V) могут быть использованы для получения кристаллических КПЗ.

А.Ф.Мишнев

Институт органического синтеза АН ЛатвССР

## МОЛЕКУЛЯРНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ДИАСТЕРЕОМЕРОВ

### 1-(1-КАРБМЕТОКСИЭТИЛ)-2-КАРБАМОИЛАЗИРИДИНА

Методом рентгеноструктурного анализа определена молекулярно-кристаллическая структура двух диастереомеров 1-(1-карбметоксиэтил)-2-карбамоилазиридина. Наличие в молекуле двух центров хиральности делает данное исследование интересным с теоретической точки зрения.

Трехмерный набор интенсивностей рефлексов получен на автодифрактометре "Синтекс-Р2<sub>1</sub>" с медным монохроматическим излучением методом  $\Theta/2\Theta$  сканирования. Кристаллы I состава C<sub>7</sub>H<sub>12</sub>O<sub>3</sub>N<sub>2</sub> моноклинные: a=5,676(1), b=8,315(2), c=9,663(2) Å, V=100,33(1) Å<sup>3</sup>, Z=2, пространственная группа P2<sub>1</sub>. Кристаллы II состава C<sub>7</sub>H<sub>12</sub>O<sub>3</sub>N<sub>2</sub> ромбические: a=5,210(1), b=8,045(1), c=22,383(5) Å, V=938,2(3) Å<sup>3</sup>, Z=4, пространственная группа P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>. Структуры расшифрованы прямым методом и уточнены методом наименьших квадратов в полноматричном анизотропном приближении до R = 0,041 и R = 0,078 соответственно.

Установлена геометрия молекул в кристалле, а также абсолютная конфигурация азиридинового хирального — R для молекулы I и S для молекулы II. Упаковка молекул в кристаллах стабилизирована водородными связями типа N — H...O.

В.А.Попов, С.Р.Трусов

Рижский политехнический институт

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЖИДКОФАЗНОГО  
ОКИСЛЕНИЯ АЛКИЛАРЕНОВ НА ЭЭМ В ДИАЛОГОВОМ РЕЖИМЕ

Основной метод синтеза ароматических кетонов и карбоновых кислот - каталитическое окисление алкиларенов и их производных кислородом в жидкой фазе. Характерной чертой кинетики таких процессов является многообразие промежуточных продуктов окисления, а также сложность состава, строения и механизма действия катализатора. Для более глубокого и полного понимания механизма окисления большое значение имеет теоретический анализ различных моделей таких процессов. Рассмотрение этих моделей позволяет получить достоверные количественные характеристики из опытных данных, предсказать те или иные особенности кинетики реакций и т.п. С этой целью была разработана диалоговая система "СДМИС" моделирования сложных химических процессов и оценки оптимальных условий их протекания. Система представляет собой пакет программ, обеспечивающий решение следующих основных задач:

1. Организация диалога человек-ЭВМ в процессе моделирования и исследования; получение справок о состоянии системы.
2. Ввод данных экспериментов и оценок предпочтений исследователя или эксперта; анализ достоверности ввода, хранения и передачи, а также семантики данных; предварительная обработка данных, в частности определение скоростей изменения концентраций в экспериментальных точках.
3. Задание одного или нескольких предполагаемых кинетических механизмов протекания химического процесса; расчет кон-

стант скорости реакций моделируемого процесса; предварительная оценка и отсев неудовлетворительных гипотез о кинетическом механизме.

4. Построение интегральных моделей процесса, проверка их адекватности и выбор окончательного варианта.

5. Построение структуры предпочтений исследователя или технолога о ходе протекания реакций; генерация, оценка и выбор оптимальных начальных значений параметров процесса на основе теории полезности и построенной модели.

6. Завершение работы с системой или очередной запрос на выполнение желаемого этапа моделирования и исследования.

Пакет программ написан на языке ФОРТРАН применительно к ДЭС СМ-4 ЭВМ, а также к ОС ЕС ЭВМ.

Система "СДМИС" была использована для моделирования и оценки процессов жидкофазного каталитического окисления дифенилметана, дезоксибензоина, 1,2-дифенилэтана и толана на ЭВМ СМ-4, а в пакетном режиме апробирована на ЕС-1022.

На основании результатов моделирования сделан вывод о характере влияния катализатора на процессы окисления, а также определены оптимальные значения начальных концентраций исходных продуктов и компонентов каталитической системы.

Система "СДМИС" ориентирована на моделирование и исследование практически любых химических процессов, о которых может быть получена некоторая статистика экспериментального или экспертного характера и желаемая точность описания которых аппаратом дифференциального исчисления предполагается достаточной.