

Схема 1.

ния реакция протекает медленно. При введении гидроксида калия увеличиваются скорости целевой и побочных реакций, что приводит к образованию смеси продуктов. Введение триэтиламина так же увеличивает скорость реакции, но, в отличие от гидроксида калия, приводит к образованию 3-(пиразол-1-ил)-1-адамантанкарбоновой кислоты без значительных количеств побочных продуктов.

Выделение целевого продукта проводилось перекристаллизацией из воды, подкисленной небольшим количеством соляной кислоты для перевода соли лиганда в кислоту.

Препаративный выход составил 21%. Вещество было идентифицировано методами газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием, инфракрасной спектроскопии и ядерного магнитного резонанса  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ .

Азолиладамантанкарбоновые кислоты являются перспективными бидентатными лигандами для конструирования 2D- 3D-металлорганических каркасных структур.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 16-33-60149.

### Список литературы

1. J.V. Faria, P.F. Vegi et.al. // *Bioorg. Med. Chem.*, 2017.– Vol.25.– Issue 21.– P.5891–5903.
2. S.K. Shrestha, A. Garzan, S. Garneau-Tsodikova // *Eur. J. Med. Chem.*, 2017.– Vol.133.– P.309–318.
3. S.G. Küçükgülzel, S. Senkardes // *Eur. J. Med. Chem.*, 2015.– Vol.97.– P.786–815;
4. E.Y. Semitut, V.Y. Komarov et.al. // *Inorg. Chem. Commun.*, 2016.– Vol.64.– P.23–26.

## ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ГЛИКОЗИДА ГЕЛИЦИНА В РЕАКЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ 4,6-АЦЕТАЛЕЙ

К.М. Файсканова

Научный руководитель – к.х.н, старший преподаватель Е.В. Степанова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, faiskanovakseniia@mail.ru

Ацетиленовые и бензилиденовые защитные группы находят широкое применение в химии углеводов [1]. Так, для получения природных соединений, обладающих биологической активностью, в нашем случае - сложных эфиров салицина, ацетиленовые и бензилиденовые

защиты необходимы.

Мы попытались ввести 4,6-бензилиденовую группу в молекулу гелицина **1**, используя стандартные реагенты: диметилацеталь бензальдегида (Схема 1, а) и бензальдегид в присутствии хлорида цинка (Схема 1, б).

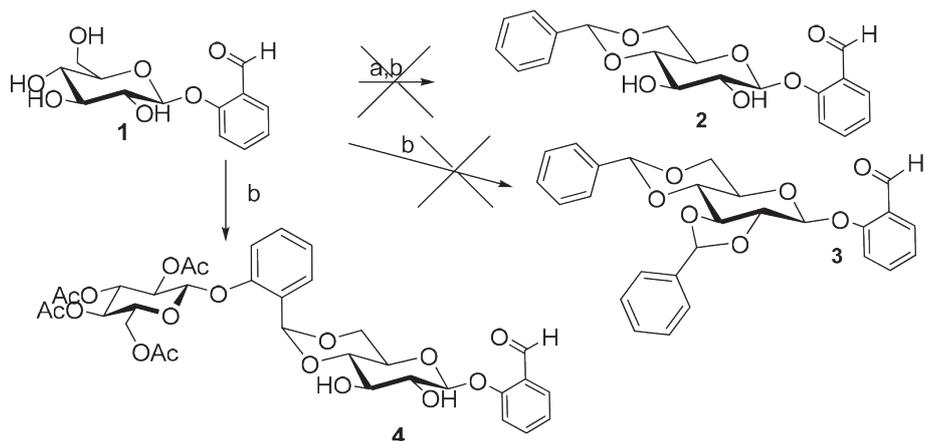


Схема 1. Попытка получения 4,6-бензилиден-производного гелицина 2.

Реагенты и условия: а) PhCH(OMe)<sub>2</sub>, TsOH, DMF, 70 °С; б) PhCOH, ZnCl<sub>2</sub>

Однако, при введении бензилиденовой группы возникли проблемы. В первом случае (схема 1, а) гелицин 1 не прореагировал и был выделен в неизменном виде, а во втором (схема 1, б) была получена смесь соединений.

Для выяснения причин такого поведения гелицина в реакциях образования 4, 6 – ацеталей применялись квантово-химические расчеты в программе Gaussian (расчет методом AM1).

Были смоделированы реакции, приведенные в схеме 1, а также рассчитана энергия Гиббса для этих превращений (таблица 1).

Результаты проведенных расчетов показывают, что все реакции термодинамически неосуществимы, однако наименьшая энергия Гиббса

Таблица 1. Энергия Гиббса в образовании продуктов реакции согласно схеме 1

	Продукт	$\Delta G$ , ккал/моль
1	2 (условие а)	8,32
2	2 (условие б)	5,42
3	Дибензилиден-производное 3	14,18
4	«Дигелицин» 4	2,27

соответствует реакции образования дибензилиден-производного 4 (путь б), следовательно, для этой реакции возможен наименьший энергетический барьер, и наибольшая вероятность протекания реакции по этому направлению. Работа выполнена при поддержке РФФИ 18-33-00365.

### Список литературы

1. Wuts P.G.M., Greene T.W. *Protective groups in organic synthesis.* – John Wiley & Sons, 2006.

## ПОДБОР ЭКСТРАКТИВНОГО АГЕНТА С ПОМОЩЬЮ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО КРИТЕРИЯ $\Delta(\Delta g^E)$

С.Б. Фролов

Научный руководитель – к.т.н., доцент В.М. Раева

МИТХТ имени Ломоносова

119435, Россия, г. Москва, ул. Пироговская 1 ст. 5

При разработке схем экстрактивной ректификации (ЭР) трехкомпонентных смесей важным аспектом является выбор селективного разделяющего агента (РА). Наиболее сложен подбор РА для разделения смесей с несколькими азеотропами.

Система ацетон (А) – тетрагидрофуран

(ТГФ) – ацетонитрил (АЦН) при 101,32 кПа содержит два бинарных азеотропа с минимальной температурой кипения: А – ТГФ – 0,95 м.д. ацетона, 329,61 К; АЦН – ТГФ – 0,19 м.д. ацетонитрила, 338,26 К. Составляющая А – АЦН азеотропна. Расчетные данные фазовых равновесий получены с использованием Aspen Plus V9.0