



## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ РЕАКЦИИ ГОМОВЕРАТРИЛАМИНА С ТРИПТОФАНОМ

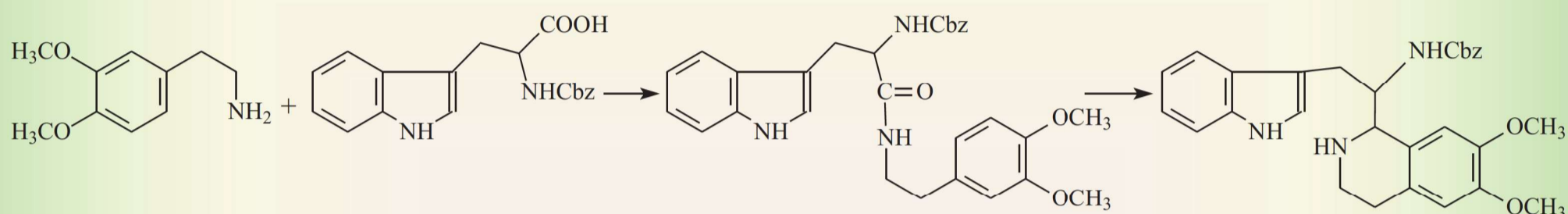
*Ишанкулов А., Саидов А.Ш., Тухтаев Д.Б., Халмурадов Т., Мухамадиев Н.К.*

Самаркандский государственный университет, факультет биологии и химии,  
Самарканд, Узбекистан, E-mail: [ishankulov-alisher@mail.ru](mailto:ishankulov-alisher@mail.ru)

Синтез производных тетрагидроизохинолинов актуален с точки зрения получения соединений с различными фармакофорными группами. При этом обоснование хода реакции квантово-химическими методами имеет особое значение для оценки протекания и осуществления запланированного органического синтеза, что и является актуальной.

Цель работы – квантово-химическое обоснование хода реакции гомовератриламина с триптофаном.

Реакция протекает по схеме (аминная группа защищена):



По данным программы PASS, конечный продукт (бензил 1-(6,7-диметокси-1,2,3,4-тетрагидроизохинолин-1-ил)-2-(1H-индол-3-ил)этилкарбамат проявляет: стимулирующую ( $P_a > 0,868$ ), антидескинетиическую ( $P_a > 0,815$ ), фибринолитическую ( $P_a > 0,767$ ) и другие активности, которые представляют практический интерес с точки зрения запланированного синтеза фармакологических препаратов и диктует проведения синтеза. В связи с этим нами проведено квантово-химическое исследование изучаемой реакции с помощью программного комплекса Gaussian-09 с использованием базисного набора VZLYP/6-31G(d,r).

На основе полученных данных составлена поверхность потенциальной энергии для реакции и определены энергии активации реакции конденсации ( $E_a = 37,2$  ккал/моль) и циклизации ( $E_a = 36,9$  ккал/моль), а по плотности электронов вокруг атомов в молекуле – реакционные центры.

Образование (бензил 1-(6,7-диметокси-1,2,3,4-тетрагидроизохинолин-1-ил)-2-(1H-индол-3-ил)этилкарбамата подтверждено проведением реакции конденсации при  $0-5^\circ\text{C}$  и циклизации при  $80^\circ\text{C}$ . Соответствие расчетного и измеренного ИК-спектров составляет 96,8 %.

