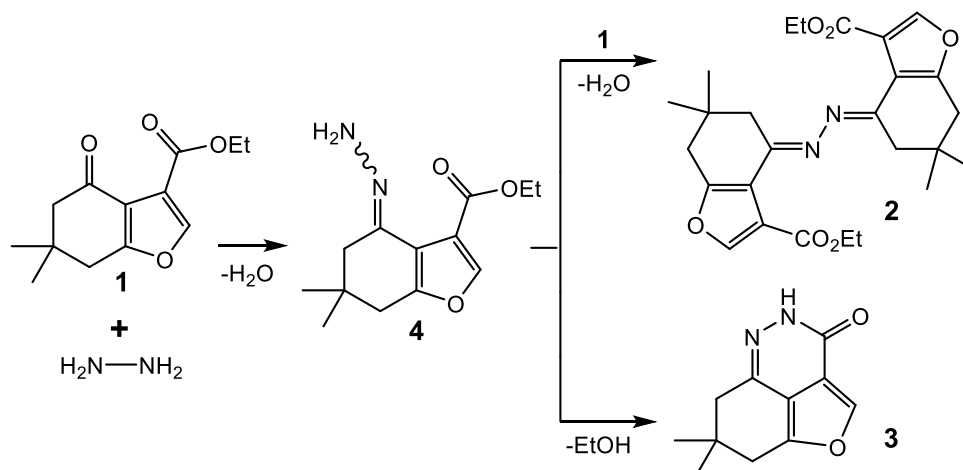


ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭТИЛ 6,6-ДИМЕТИЛ-4-ОКСО-4,5,6,7-ТЕТРАГИДРОБЕНЗО-ФУРАН-3-КАРБОКСИЛАТА С ГИДРАЗИНОМ: DFT ИССЛЕДОВАНИЕ

Верещагина Я.А.^а, Кузнецова А.А.^а, Гомонов К.А.^б, Пелипко В.В.^б, Макаренко С.В.^б^аКазанский федеральный университет,
Химический институт имени А.М. Бутлерова, Казань, Россия
e-mail: yavereshchagina@gmail.com^бРоссийский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена,
Санкт-Петербург, Россия

Гидразоны замещенных фуранов обладают потенциальной биологической активностью [1]. Недавно предложен метод синтеза гидразонов алкил 4-оксо-4,5,6,7-тетрагидробензофуран-3-карбоксилатов в *E*-конфигурации [2]. Взаимодействие этил 6,6-диметил-4-оксо-4,5,6,7-тетрагидробензофуран-3-карбоксилата **1** с гидразином может приводить к двум типам продуктов: в мягких условиях образуется *бис*-гидразон **2**, а ужесточение условий приводит к образованию фуроциннолин-3-она **3** [2].

Для выявления особенностей протекания этих взаимодействий мы изучили механизм реакций с помощью метода квантовой химии DFT B3PW91/6-311++G(df,p) с включением молекул растворителя. Согласно теоретическим расчётам, реакция **1** с гидразином с последующим отщеплением молекулы воды приводит к промежуточному гидразону **4** в *E*- или *Z*-конфигурации. Диэтил 4,4'-(гидразин-1,2-диилиден)(4*E*,4'*E*)-бис(6,6-диметил-4,5,6,7-тетрагидробензофуран-3-карбоксилат – *бис*-гидразон **2** – предпочтительно образуется из *E*-формы **4** и дополнительной молекулы **1**, тогда как для формирования 7,7-диметил-2,6,7,8-тетрагидро-3Н-фуро[4,3,2-де]циннолин-3-она **3** благоприятна *Z*-конфигурация **4**, геометрия которой приближена к структуре продукта.



Будут обсуждены структурные и энергетические характеристики всех участников процесса и переходные состояния всех стадий реакций.

Литература

1. S.S. Chourasiya, D. Kathuria, A.A. Wani, P.V. Bharatam *Org. Biomol. Chem.*, 2019, **17**, 8486.
2. K.A. Gomonov, V.V. Pelipko, I.A. Litvinov et al. *Monatsh Chem.*, 2025, **156**, 287.