

OpenFOAM – свободно распространяемый инструментальный вычислительной гидродинамики для операций с полями (скалярными, векторными и тензорными). OpenFOAM позволяет решать полные уравнения с различными условиями, которые, обычно, не возможно решить аналитически, но становится возможным с помощью OpenFOAM. Для этого необходимо построить 3D-модель расчетной области, например, в программе КОМПАС-3D или же AutoCAD. После построения расчетной области строим расчетную сетку, что возможно сделать с помощью утилиты snappyHexMesh (рисунок 2). С помощью одного из решателей используем полученную расчетную сетку для вычисления полей скоростей и давлений (рисунок 2) в перерабатываемом материале.

СИНТЕЗ N-(3,5-ДИМЕТИЛАДАМАНТ-1-ИЛ)-2-ТОЗИЛГИДРАЗИН-1-КАРБОКСАМИДА

Рассказова Е.В., Дьяченко В.С., Бурмистров В.В., Бутов Г.М.

Волжский политехнический институт, филиал Волгоградского государственного технического университета, Волжский, e-mail: elena.rasskazova.96@mail.ru

В последнее время внимание многих исследователей приковано к химии адамантил содержащих соединений. Некоторые производные содержащие адамантильный фрагмент используются в качестве лекарственных препаратов (римантадин, мемантин и др.). Исследование 1,3-дизамещённых мочевины, содержащих в своём составе адамантильную группу, является актуальным благодаря проявляемой высокой ингибирующей активностью по отношению к растворимой эпосигидролазе человека. Ингибирование этого фермента создает положительные предпосылки для подавления воспалительного процесса, вызванного образованием продуктов метаболизма. Среди широкого спектра ингибиторов эпосигидролазы наибольшую активность показали адамантилсодержащие 1,3-дизамещённые мочевины, общей формулы: Ad₁-NHC(O)NH-R [1-3].

В нашей работе была синтезирована N-(3,5-диметиладамант-1-ил)-2-тозилгидразин-1-карбоксамид мочевины имеющая в своей структуре одну мочевиновую группу. Наличие в молекуле мочевины вторичной аминогруппы может повысить ингибирующую активность данного соединения. Для изоцианатов характерна реакции нуклеофильного присоединения. В ходе реакции присоединения нуклеофил (4-метилбензолсульфонилгидразин) атакует по месту полного или частичного положительного заряда на электрофиле т.к. имеет неподеленную электронную пару у атома азота [4].

В качестве исходных соединений для получения целевого продукта использовали 1-изоцианато-3,5-диметиладамантан полученный по методике [5], 4-метил-бензолсульфонилгидразин которые является коммерчески доступными продуктом.

Реакцию получения N-(3,5-диметиладамант-1-ил)-2-тозилгидразин-1-карбоксамид проводили в диметилформамиде (ДМФА) при температуре 15-25°C, при молярном соотношении реагентов 1:1. Реакционную смесь перемешивали в течение 4 часов после чего в реакцию добавляли дистиллированную воду и смесь перемешивали ещё 30 минут. Выпавший кристаллический осадок отфильтровывали, промывали водой и этилацетатом. Полученное твердое вещество сушили в вакууме. Образующееся вещество плохо растворимо в ДМФА, что облегчало ее выделение и очистку. Выход продукта после очистки составил 96%. Идентификацию состава и строения полученного соединения доказывали с помощью ЯМР ¹H-спектроскопии и масс-спектрометрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для молодых кандидатов наук (проект № МК-5809.2015.3).

Список литературы

1. Бурмистров В.В., Першин В.В., Бутов Г.М. Синтез и химические свойства 1-изоцианато-3,5-диметиладамантана // Известия ВолгГТУ: межвуз. сб. науч. ст. № 5(92) / ВолгГТУ. – Волгоград, 2012. – С. 62–66.
2. Бутов Г.М., Першин В.В., Бурмистров В.В. Реакции 1,3-дегидрадамантана с органическими изоцианатами // Журнал органической химии. – 2011. – Т. 47. – Вып. 4. – С. 601-602.
3. Vladimir Burmistrov, Christophe Morisseau, Dmitry Danilov, Todd R. Harris, Igor Dalinger, Irina Vatsadze, Tatiana Shkineva, Gennady M. Butov, Bruce D. Hammock 1,3-Disubstituted and 1,3,3-trisubstituted adamantyl-ureas with isoxazole as soluble epoxide hydrolase inhibitors // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2015, 25, 5514-5519
4. Бурмистров В.В., Бутов Г.М., Данилов Д.В. Синтез и исследование свойств диadamантилсодержащих 1,3-дизамещённых мочевины // Известия ВолгГТУ: межвуз. сб. науч. ст. № 22 (149). / ВолгГТУ. – Волгоград, 2014. – (Серия «Химия и технология элементарно-органических мономеров и полимерных материалов»; вып. 13). – С. 45-48.
5. Vladimir Burmistrov, Christophe Morisseau, Kin Sing Stephen Lee, Diyala S. Shihadih, Todd R. Harris, Gennady M. Butov, Bruce D. Hammock Symmetric adamantyl-diureas as soluble epoxide hydrolase inhibitors // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2014, 24, 2193-2197.

СИНТЕЗ N-(3,5-ДИМЕТИЛАДАМАНТАН-1-ИЛ)-2-(ФЕНИЛСУЛЬФОНИЛ)ГИДРАЗИН-1-КАРБОКСАМИДА

Солопов В.А., Дьяченко В.С., Бурмистров В.В., Бутов Г.М.

Волжский политехнический институт, филиал Волгоградского государственного технического университета, Волжский, e-mail: fines001@mail.ru

В последнее время большое внимание уделяется 1,3-дизамещённым мочевины, имеющим в своем составе одну или две адамантильные группы. Интерес к подобным соединениям вызван не только благодаря их биологической активности, но и возможностью использовать диadamантил содержащие мочевины в качестве мономеров для циклодекстриновых супрамолекулярных полимеров [1].

Адамантилсодержащие 1,3-дизамещённые мочевины обладают высокой ингибирующей активностью в отношении растворимой эпосигидролазы (sEH) человека. Размер адамантильного радикала совпадает с размером полости активного центра фермента, поэтому наличие в составе мочевины адамантильного

