

## Синтез 1*H*- и 2*H*-бензотриазол-1-илметилалкил- и арилсульфонатов

© **Виноградов<sup>1\*</sup> Сергей Александрович, Белоусова<sup>1+</sup> Зоя Петровна, Селезнева<sup>2</sup> Екатерина Сергеевна**

<sup>1</sup> Кафедра неорганической химии; <sup>2</sup> Кафедра биохимии, биотехнологии и биоинженерии. Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва. Московское шоссе, 34. г. Самара, 443086. Самарская область. Россия. Тел.: <sup>1)</sup> +7 (846) 334-54-59; <sup>2)</sup> +7 (846) 336-99-42.

E-mail: zbelousova@mail.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** метилметансульфонаты, 1-(1*H*-бензотриазол-1-ил), 2-(2*H*-бензотриазол-2-ил), метилбензолсульфонаты, 1-(1*H*-бензотриазол-1-ил), 2-(2*H*-бензотриазол-2-ил), метил-*n*-толуолсульфонаты, 1-(1*H*-бензотриазол-1-ил), 2-(2*H*-бензотриазол-2-ил).

### Аннотация

Для получения новых 1*H*- и 2*H*-бензотриазол-1-илметилалкил- и арилсульфонатов были проведены реакции между 1*H*-бензотриазол-1-илметанолом и 2*H*-бензотриазол-2-илметанолом с хлорангидридами метан-, бензол- и *n*-толуолсульфокислот в ацетоне в присутствии карбоната калия. Идентификацию вновь синтезированных соединений проводили на основании анализа и ИК и ЯМР <sup>1</sup>H спектров. В ИК спектрах сульфонов – 1*H*-бензотриазол-1-илметанола и 2*H*-бензотриазол-2-илметанола, исчезает широкая полоса высокой интенсивности поглощения гидроксильной группы метиленового звена (3421 см<sup>-1</sup> и 3416 см<sup>-1</sup>) и появляются полосы поглощения, соответствующие валентным колебаниям (–SO<sub>2</sub>–O–) группы (1302-956 см<sup>-1</sup>). В спектрах ЯМР <sup>1</sup>H соединений – 1-(1*H*-бензотриазол-1-ил)метилметансульфоната, 1-(1*H*-бензотриазол-1-ил)метилбензолсульфоната и 1-(1*H*-бензотриазол-1-ил)метил-*n*-толуолсульфоната, сигналы протонов при C<sub>4</sub>, C<sub>5</sub>, C<sub>6</sub> и C<sub>7</sub> бензотриазольного фрагмента проявляются в виде мультиплетов в зависимости от структуры остатка сульфокислоты в области 7.34-8.01 м.д. Характеристические сигналы протонов в спектрах ЯМР <sup>1</sup>H соединений – 2-(2*H*-бензотриазол-2-ил)метилбензолсульфоната, 2-(2*H*-бензотриазол-2-ил)метилбензолсульфоната и 2-(2*H*-бензотриазол-2-ил)метил-*n*-толуолсульфоната, при C<sub>4</sub> и C<sub>7</sub> и C<sub>5</sub> и C<sub>6</sub> бензотриазольного фрагмента также представляют собой мультиплеты в областях 7.83-7.94 м.д. и 7.38-7.42 м.д., соответственно. Прогноз спектра биологической активности полученных соединений в программе PASS Online показал, что виды биологической активности в большей степени определяются структурой изомера производного бензотриазола. Это подтверждается несовпадением видов биологической активности 1*H*- и 2*H*-бензотриазол-1-илметилалкил- и арилсульфонатов. Результаты расчетов физико-химических параметров, проведенных с использованием программы Spartan<sup>14</sup> (липофильности, дипольного момента и объёма молекулы) позволяют объяснить отличающиеся виды предполагаемой биологической активности 1*H*- и 2*H*-бензотриазол-1-илметилалкил- и арилсульфонатов воздействием на разные рецепторы.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Виноградов С.А., Белоусова З.П., Селезнева Е.С. Синтез 1*H*- и 2*H*-бензотриазол-1-илметилалкил- и арилсульфонатов. *Бутлеровские сообщения*. **2025**. Т.81. №3. С.24-31. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-3-24

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Виноградов С.А., Белоусова З.П., Селезнева Е.С. Синтез 1*H*- и 2*H*-бензотриазол-1-илметилалкил- и арилсульфонатов. *Бутлеровские сообщения А*. **2025**. Т.10. №1. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-3-24/ROI-jbc-RA/25-10-1-12

### The output for citing the English online version of the article:

Sergey A. Vinogradov, Zoya P. Belousova, Ekaterina S. Selezneva. Synthesis of 1*H*- and 2*H*-benzotriazol-1-ylmethylalkyl and arylsulfonates. *Butlerov Communications A*. **2025**. Vol.10. No.1. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-3-24/ROI-jbc-A/25-10-1-12