

## Получение лактамсодержащих производных алкилфенолов

© Воробьев<sup>+</sup> Степан Владимирович, Примерова Ольга Вячеславовна,  
Кошелев\* Владимир Николаевич и Иванова Людмила Вячеславовна

Кафедра органической химии и химии нефти. Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина. Ленинский проспект, 65 к. 1. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (916) 641-72-16. E-mail: vorstepan@yandex.ru

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** алкилфенолы, органический синтез, исследование взаимосвязи «структура-активность», квантовохимические расчеты.

### Аннотация

В работе описан синтез лактамометильных производных некоторых алкилфенолов (тимола и 2,4-ди-*трет*-бутилфенола), содержащих фрагменты бутиролактама, валеролактама, капролактама и 4-фенилпирролидона. Получение таких соединений является перспективным для поиска новых эффективных антиоксидантов с низкой токсичностью и, как следствие, широким возможным спектром применения. Строение целевых соединений установлено методами ИК- и ЯМР-спектроскопии. В ИК-спектрах синтезированных соединений наблюдается смещение характеристичной полосы поглощения карбонильной группы ( $\text{C}=\text{O}$ ) в несколько меньшую (около  $1600\text{ см}^{-1}$ ) область по сравнению с ожидаемой. Это обусловлено образованием внутри- и межмолекулярных водородных связей этой группы с гидроксильной группой фенола. В спектрах  $^1\text{H}$ -ЯМР сигналы протонов лактамных фрагментов и алкильных заместителей фенолов расположены в области сильного поля (1.50-3.50 м.д.) и имеют вид соответствующих мультиплетов. Величина химического сдвига протонов «метиленового мостика» ( $\text{-CH}_2\text{-}$  группы) – около 4.00 м.д. Сигнал имеет вид синглета в большинстве случаев. В области слабого поля расположены сигналы ароматических и гидроксильных протонов. Для продуктов, содержащих фрагмент 4-фенилпирролидона, сигнал метиленового мостика представляет собой АВ-систему вследствие наличия асимметрического атома азота. Для всех полученных веществ выполнен прогноз *in silico* биологической активности и острой токсичности с использованием программ «Pass-online» и «Gusar-online». Показано, что целевые соединения обладают широким спектром потенциальной биологической активности, и относятся к нетоксичным или малотоксичным веществам. Возможная антиокислительная активность полученных соединений для реакции  $\text{ROO}\cdot + \text{ArOH} \rightarrow \text{ROOH} + \text{ArO}\cdot$  была рассчитана с помощью квантовохимического метода (полуэмпирический метод PM6) по энергии разрыва связи  $\text{ArO-H}$ . Установлено, что введение лактамометильного фрагмента в ароматическое кольцо фенола понижает энергию разрыва связи, если фрагмент находится в *пара*-положении к гидроксильной группе. Лактамометильный фрагмент в орто-положении к гидроксильной группе, напротив, увеличивает прочность связи  $\text{O-H}$  в гидроксильной группе из-за образования водородной связи с карбонильной группой лактама.