

Синтез бензилоксибензильных производных 2- и 4-(1*H*-азол-1-илметил)фенолов

© Белоусова^{1*} Зоя Петровна, Пурыгин¹ Петр Петрович
и Кошелев² Владимир Николаевич

¹ Кафедра органической, биоорганической и медицинской химии. Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва. Московское шоссе, 34.

г. Самара, 443086. Самарская область. Россия. Тел.: (846) 334-54-59. E-mail: zbelousova@mail.ru

² Кафедра органической химии и химии нефти. Российский государственный университет нефти и газа имени И.М. Губкина. Ленинский проспект, 65, корп. 1. г. Москва, 119991. Россия.

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гетероциклы, имидазол, 2-метилимидазол, 1,2,4-триазол, бензимидазол, 2-метилбензимидазол, бензотриазол, 2-(1*H*-азол-1-илметил)фенолы, 4-(1*H*-азол-1-илметил)фенолы, бензил фениловые эфиры 1*H*-азолов, 1-[2-(бензилокси)бензил]-1*H*-азолы и 1-[4-(бензилокси)бензил]-1*H*-азолы, липофильность.

Аннотация

Сообщается о синтезе 1-[2-(бензилокси)бензил]- и 1-[4-(бензилокси)бензил]-1*H*-азолов. Эти соединения были получены из соответствующих 2- и 4-(1*H*-азол-1-илметил)фенолов в присутствии гидрида натрия в безводном диметилформамиде. В качестве азольной компоненты использовали азотсодержащие соединения с различным числом атомов азота в цикле, их метилированные и бензоконденсированные производные: имидазол, 2-метилимидазол, 1,2,4-триазол, бензимидазол, 2-метилбензимидазол, бензотриазол. Структуру соединений подтверждали данными ИК и ЯМР ¹H спектроскопии. В ИК спектрах 1-[2-(бензилокси)бензил]- и 1-[4-(бензилокси)бензил]-1*H*-азолов исчезает полоса валентных колебаний гидроксильной группы в области 3135–2480 см⁻¹, характерной для азолиметилфенолов, дополнительное оксиметиленовое звено регистрируется в виде нескольких пиков в области 1260-1014 см⁻¹, что доказывает присутствие в структуре бензилоксибензильных производных 2- и 4-(1*H*-азол-1-илметил)фенолов фрагмента (–C_{аром}–O–C–). В спектрах ЯМР ¹H для оксиметиленовых групп (–CH₂O–) имеются дополнительные сигналы в виде синглетов в области 5.12–5.14 м.д. для *орто*-производных и 5.12 м.д. для *пара*-производных соответственно для 1-[2-(бензилокси)бензил]- и 1-[4-(бензилокси)бензил]-1*H*-азолов. Для расчета липофильности как полученных, так и исходных соединений использована программа ALOGPS 2.1. Все 1-[2-(бензилокси)бензил]- и 1-[4-(бензилокси)бензил]-1*H*-азолы в отличие от 2- и 4-(1*H*-азол-1-илметил)фенолов характеризуются высокой липофильностью. Липофильность бензиловых эфиров 4-(1*H*-азол-1-илметил)фенолов выше, чем для эфиров 2-(1*H*-азол-1-илметил)фенолов, что, вероятно, связано с большей пространственной доступностью гидрофобной ван-дер-ваальсовой поверхности в случае бензиловых эфиров 4-(1*H*-азол-1-илметил)фенолов. Метилированные по азольным фрагментам производные также характеризуются повышенной липофильностью по сравнению с их неметилированными аналогами. Наиболее липофильными оказались производные бензимидазола и бензотриазола.