

## Синтез, структура и реакционная способность оксалилди(4-метилимидазола)

© Пурыгин<sup>1\*</sup> Пётр Петрович, Шаргало<sup>1</sup> Алина Васильевна,  
Милютин<sup>1</sup> Константин Вячеславович, Григорьева<sup>2</sup> Ольга Борисовна  
и Зарубин<sup>1</sup> Юрий Павлович

<sup>1</sup>Кафедра неорганической химии. Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева. Московское шоссе, 34. г. Самара, 443086. Самарская область. Россия.

Тел: (846) 334-54-59. E-mail: puruginpp2002@mail.ru

<sup>2</sup>Кафедра «Химия, химические процессы и технологии». Тольяттинский государственный университет. ул. Белорусская, 14а. г. Тольятти, 445020. Самарская область. Россия.

Тел: (903) 330-17-14. E-mail: groly@yandex.ru

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

**Ключевые слова:** оксалилди(4-метилимидазол), синтез, гидролиз, алкоголиз, аминолит, кинетика, константа скорости, период полураспада, расчеты, термодинамические характеристики, квантово-химические, молекулярно-механические, биологическая активность, прогнозирование.

### Аннотация

В статье описан двухстадийный метод синтеза оксалилди(4-метилимидазола) из 4(5)-метилимидазола через 1-триметил-4-метилимидазол с последующим взаимодействием с оксалилхлоридом; выход конечного продукта – 89%. Изучена кинетика гидролиза, алкоголиза и аминолита оксалилди(4-метилимидазола) в системах ацетонитрил – вода (9 : 1), ацетонитрил – метанол (9 : 1), ацетонитрил – диэтиламин (9 : 1) при 25 °С. Для исследования термодинамических особенностей реакций получения данного соединения в программе Spartan<sup>14</sup> 1.1.4 был рассчитан ряд термодинамических характеристик, определяющих самопроизвольный и экзотермический характер процесса. Полученные данные позволяют подобрать оптимальные условия синтеза оксалилди(4-метилимидазола) и сделать вывод о его низкой устойчивости в средах, содержащих нуклеофилы.

Для молекулы оксалилди(4-метилимидазола) найдены возможные конформеры в программе Molecular Operating Environment 2014.0901, для которых были рассчитаны поверхности нуклеофильной восприимчивости в программе SCIGRESS Modeling 3.1.4. Показано, что наиболее реакционноспособны конформеры, у которых карбонильные группы минимально экранированы фрагментами 4-метилимидазола.

Структура оксалилди(4-метилимидазола) была подтверждена методами ИК и ЯМР <sup>1</sup>Н спектроскопии. В ИК спектрах были обнаружены характеристические полосы поглощения, подтверждающие наличие соответствующих функциональных групп в структуре соединения, в ЯМР <sup>1</sup>Н спектрах были обнаружены сигналы протонов с характерными химическими сдвигами для соответствующих функциональных групп. В программе PASS Professional 2007 были спрогнозированы наиболее вероятные виды биологической активности исследуемого соединения. Наиболее значимыми видами биологической активности являются в отношении урологических заболеваний, антисеборейное действие, стимулянт функции почек, стимулятор лейкопоэза.