

## Синтез 1,1'-оксалилдибензотриазола, изучение кинетических и термодинамических особенностей его гидролиза и прогнозирование биологической активности

© Пурьгин<sup>1\*</sup> Пётр Петрович, 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: [puryginpp2002@mail.ru](mailto:puryginpp2002@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. Email: [groly@yandex.ru](mailto:groly@yandex.ru)

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

**Ключевые слова:** 1,1'-оксалилдибензотриазол, синтез, гидролиз, алкоголиз, аминализ, кинетика, устойчивость в средах содержащих нуклеофилы, константа скорости гидролиза, константа скорости алкоголиза, константа скорости аминализа, период полураспада, термодинамические характеристики, расчеты, квантово-химические, молекулярно-механические, биологическая активность, прогнозирование.

### Аннотация

В статье описан двухстадийный метод синтеза 1,1'-оксалилдибензотриазола (бис(1*H*-бензотриазол-1-ил)этан-1,2-диона) из бензотриазола через 1-триметилсилилбензотриазол с последующим взаимодействием с оксалилхлоридом; выход конечного продукта – 87%. Изучена кинетика гидролиза, алкоголиза и аминализа 1,1'-оксалилдибензотриазола в системах ацетонитрил – вода (9:1), ацетонитрил – метанол (9:1), ацетонитрил – диэтиламин (9:1) при 25 °С, а также по уравнению Аррениуса были рассчитаны значения энергии активации в реакциях гидролиза, алкоголиза и аминализа 1,1'-оксалилдибензотриазола. Для исследования термодинамических особенностей реакций получения данного соединения в программе Spartan'14 1.1.4 был рассчитан ряд термодинамических характеристик, определяющих самопроизвольный и экзотермический характер процесса.

Для молекулы 1,1'-оксалилдибензотриазола найдены возможные конформеры в программе Molecular Operating Environment 2014.0901, для которых были рассчитаны поверхности нуклеофильной восприимчивости в программе SCIGRESS Modeling 3.1.4.

Структура 1,1'-оксалилдибензотриазола была подтверждена методами ИК и ЯМР <sup>1</sup>H спектроскопии. В программе PASS Professional 2007 были спрогнозированы наиболее вероятные виды биологической активности исследуемого соединения. Наиболее значимыми видами биологической активности являются в отношении почечных заболеваний, антинейротоксическая, антацидная, противовоспалительная. Полученные данные позволяют подобрать оптимальные условия синтеза 1,1'-оксалилдибензотриазола и сделать вывод о его низкой устойчивости в средах, содержащих нуклеофилы.