

## Синтез и исследование реакционной способности 1,1'-оксалилди(2-метилимидазола) в реакциях с N-нуклеофилами

© Пурыгин\* Пётр Петрович, Федотова Виктория Дмитриевна,  
Алексеев Виталий Юрьевич и Зарубин<sup>+</sup> Юрий Павлович

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

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

**Ключевые слова:** 1,1'-оксалилди(2-метилимидазол), синтез, реакционная способность, нуклеофильная восприимчивость, электрофильная восприимчивость, расчеты, молекулярно-механические, квантово-химические, термодинамические параметры, биологическая активность, прогнозирование.

### Аннотация

В статье описан синтез 1,1'-оксалилди(2-метилимидазола), который получали в две стадии. На первой стадии синтеза были получены 1-триметилсилил-2-метилимидазол и оксалилхлорид. На второй стадии синтеза получали целевой продукт путем взаимодействия 1-триметилсилил-2-метилимидазола с оксалилхлоридом. Продукт представлял собой кристаллическое вещество темного оттенка, выход конечного продукта – 83%.

Структура 1,1'-оксалилди(2-метилимидазола) была подтверждена методами ИК и ЯМР <sup>1</sup>H спектроскопии. В ИК спектрах были обнаружены характеристические полосы поглощения, подтверждающие наличие соответствующих функциональных групп в структуре соединения, в <sup>1</sup>H ЯМР спектре были обнаружены сигналы протонов с характерными химическими сдвигами для соответствующих функциональных групп. В программе PASS online спрогнозированы виды биологической активности исследуемого соединения. Наиболее вероятны возможности применения в лечении урологических заболеваний, сахарного диабета, стафилококковых, онкологических заболеваний, антиагрегационное действие.

Для молекулы 1,1'-оксалилди(2-метилимидазола) найдены 6 конформеров, которые представляли собой три пары энантиоконформеров в программе Molecular Operating Environment 2009.10, для которых были рассчитаны электростатический потенциал, поверхности нуклеофильной и электрофильной восприимчивостей в программе SCIGRESS Modeling 3.1.4. Показано, что для молекулы 1,1'-оксалилди(2-метилимидазола) наиболее характерно взаимодействие с нуклеофильными реагентами. Проведены расчёты потенциальной энергии конформеров молекул 1,1'-оксалилди(2-метилимидазола).

С использованием 1,1'-оксалилди(2-метилимидазола) осуществлены синтезы ацетанилида, бензанилида и диэтилформамида. Данные синтезы были проведены для того, чтобы проверить реакционную способность и возможность образования амидного типа связи при активации карбоксильной группы в карбоновых кислотах. Реакции проводились в одну стадию без выделения промежуточного 2-метилимидазолида соответствующей карбоновой кислоты. При этом предполагаемый механизм реакции должен быть двухстадийным.

Методами компьютерной химии рассчитаны возможные структуры реагентов, переходных состояний и продуктов реакций при взаимодействии 1,1'-оксалилди(2-метилимидазола) с карбоновыми кислотами и аминами.