

## 1-Гидрокси-2-арил(алкил)-1*H*-нафто[2,3-*d*]имидазол-4,9-дионы, их алкилирование и таутомерия

© Горностаев<sup>1\*</sup> Леонид Михайлович, Нуретдинова<sup>1</sup> Эльвира Викторовна,  
Фоминых<sup>1</sup> Ольга Игоревна, Ромашкова<sup>1</sup> Юлия Геннадьевна  
и Полещук<sup>2</sup> Олег Хемович

<sup>1</sup> Кафедра биологии, химии и экологии. Красноярский государственный педагогический университет им. В.П. Астафьева. ул. А. Лебедевой, 89. Красноярск, 660049. Россия. E-mail: gornostaev@kpspu.ru  
<sup>2</sup> Кафедра химии и методики обучения химии. Томский государственный педагогический университет. ул. Киевская, 60. г. Томск, 634061. Россия. E-mail: poleshch@tspu.edu.ru

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

**Ключевые слова:** хиноны, 1-гидроксиимидазолы, прототропная гидроксиимидазол-*N*-оксидная таутомерия.

### Аннотация

Азотсодержащие полициклические хиноидные соединения вызывают интерес, поскольку некоторые из них обладают различными видами биологической активности, в том числе противоопухолевой активностью. Особый интерес вызывают хиноидные *N*-оксиды – потенциальные окислители и источники оксида азота.

Известно, что 1-*R*-4,9-диоксо-1*H*-нафто[2,3-*d*][1,2,3]триазол-2-оксиды, а также продукты их оксимирования – 1-*R*-4,9-диоксо-1*H*-нафто[2,3-*d*][1,2,3]триазол-2-оксид-4-оксимы обладают противоопухолевой активностью, сопоставимой с активностью доксорубина. В этой связи, представляет интерес изучение других производных нафтохинона, содержащих *N*-оксидный фрагмент.

Авторами статьи усовершенствован способ получения 1-гидрокси-2-фенил-1*H*-нафто[2,3-*d*]имидазол-4,9-диона. При этом выход целевого продукта повышен с 67% до 84%. Методами двумерной ЯМР-спектроскопии уточнены спектральные параметры 2-фенил-1*H*-нафто[2,3-*d*]имидазол-4,9-диона. Показано, что его алкилирование приводит к 1-метокси(этокси)-2-фенил-1*H*-нафто[2,3-*d*]имидазол-4,9-диону. Изучены ЯМР <sup>1</sup>H и ЯМР <sup>13</sup>C спектры полученных продуктов алкилирования, а также электронные спектры поглощения исследуемых исходных веществ.

Квантово-химическим методом DFT B3LYP/6-311++G(d,p) (GAUSSIAN-09) подтверждено, что 1-гидрокси-2-фенил-1*H*-нафто[2,3-*d*]имидазол-4,9-дион и 1-гидрокси-2-метил-1*H*-нафто[2,3-*d*]имидазол-4,9-дион существуют в двух тауто-мерных формах, причем *N*-оксидная форма преобладает в дихлорэтаноле.