

Синтез и спектральные характеристики 5-(арилоксиметил)-3-арил-1,2,4-оксадиазолов

© Котов¹⁺ Александр Дмитриевич, Васильева² Елена Андреевна,
Проскурина¹ Ирина Константиновна, Кужин³ Максим Борисович,
Лебедев Антон Сергеевич³, Шетнев⁴ Антон Андреевич,
Корсаков^{4*} Михаил Константинович

¹ Кафедра химии, теории и методики преподавания химии; ⁴ Центр трансфера фармацевтических технологий им. М.В. Дорогова. Ярославский государственный педагогический университет им. К.Д. Ушинского. ул. Республиканская, 108. г. Ярославль, 150000. Россия.

Тел.: +7 (845) 273-15-29. E-mail: kotad@mail.ru

² Кафедра органической химии. Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина. ул. Малая Калужская, 1, корпус №5. г. Москва, 119071. Россия.

³ Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова. ул. Советская, 14. г. Ярославль, 150003. Ярославская область. Россия.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 1,2,4-оксадиазолы, простые эфиры, синтез, ЯМР-спектроскопия, ИК-спектроскопия, масс-спектрометрия, характеристичные ионы.

Аннотация

Производные 1,2,4-оксадиазолов благодаря наличию разнообразных полезных свойств постоянно привлекают внимание химиков-исследователей. Соединения, содержащие данный гетероциклический фрагмент, являются компонентами многих лекарственных средств, выступают в качестве основы для получения жидких кристаллов, высокоэнергетических соединений, сенсоров, красителей, люминофоров и т.д. В представленной работе реакцией нуклеофильного замещения хлора в 5-(хлорметил)-3-арил-1,2,4-оксадиазолах различными фенолами получен ряд 5-(арилоксиметил)-3-арил-1,2,4-оксадиазолов с выходами 46-66%. Строение полученных эфиров подтверждено результатами элементного анализа, данными спектроскопии ЯМР ¹H, ¹³C, ИК, масс-спектрометрии. В статье обсуждаются особенности спектральных характеристик синтезированных соединений. Данные ЯМР ¹H и ЯМР ¹³C спектров соответствуют структуре всех полученных 5-(арилоксиметил)-3-арил-1,2,4-оксадиазолов. На ИК спектрах всех исследованных соединений в области 1571-1579 см⁻¹ наблюдаются полосы поглощения, ответственные за валентные колебания связей C=N, а также две полосы поглощения при 1220-1260 и 1059-1070 см⁻¹, соответствующие антисимметричным и симметричным валентным колебаниям связей C_{Ar}-O-CH₂. Для 5-(феноксиметил)-3-арил-1,2,4-оксадиазолов выявлена линейная зависимость волнового числа низкочастотных симметричных валентных колебаний эфирной связи от σ -констант Гаммета заместителей в арильном фрагменте. Методом хромато-масс-спектрометрии изучены направления фрагментации молекулярных ионов синтезированных соединений. Анализ масс-спектров 5-(арилоксиметил)-3-арил-1,2,4-оксадиазолов позволил отметить, что для них характерны пики молекулярных ионов M⁺ средней интенсивности. Устойчивость молекулярных ионов уменьшается для соединений, содержащих 4-метокси-феноксиметильный радикал в положении 5 гетероцикла. В работе предложены схемы фрагментации молекулярных ионов синтезированных соединений, идентифицированы характеристичные ионы. Установлено, что фрагментация молекулярных ионов для всех исследованных 5-(арилоксиметил)-3-арил-1,2,4-оксадиазолов происходит с разрывом связи ArO-CH₂. Это приводит к появлению в масс-спектрах характеристических пиков ионов [ArO]⁺ или [M-OAr]⁺ с высокой интенсивностью.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Котов А.Д., Васильева Е.А., Проскурина И.К., Кужин М.Б., Лебедев А.С., Шетнев А.А., Корсаков М.К. Синтез и спектральные характеристики 5-(арилоксиметил)-3-арил-1,2,4-оксадиазолов. *Бутлеровские сообщения*. 2023. Т.74. №4. С.12-21. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-74-4-12

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Котов А.Д., Васильева Е.А., Проскурина И.К., Кужин М.Б., Лебедев А.С., Шетнев А.А., Корсаков М.К. Синтез и спектральные характеристики 5-(арилоксиметил)-3-арил-1,2,4-оксадиазолов. *Бутлеровские сообщения А*. 2023. Vol.5. No.2. Id.2. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RA/23-5-2-2