

Aryl = Ph (**2i**), 3-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**2j**), 4-(Et<sub>2</sub>N)C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**2k**), 4-EtOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**2l**), 2,4,6-Me<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub> (**2m**), 4-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**2n**), 2-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**2o**), 3-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**2p**), 3,5-Cl<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub> (**2q**), 3-Cl-4-FC<sub>6</sub>H<sub>3</sub> (**2r**), 4-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**2s**), 3-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub> (**2t**), 4-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub> (**2u**), 4-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**2v**).

Рис. 2. Библиотека полученных 2-Н-1,2,3-триазол-1-оксидов

санных 2-Н-1,2,3-триазол-1-оксидов (**2a–v**) с различными заместителями в положениях N(2), C(4) и C(5) гетероцикла с хорошими выходами (Рисунок 2).

Полученные данные позволяют заявить о разработке универсального экологичного и

атом-экономичного метода получения различных 2-Н-1,2,3-триазол-1-оксидов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-73-10109).

## ПРИМЕНЕНИЕ ГАЛОГЕННОЙ СВЯЗИ В КОНТРОЛЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НИТРОНИЛ-НИТРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ

М. К. Шуриков

Научный руководитель – к.х.н., доцент ИШХБМТ П. В. Петунин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, г. Томск, проспект Ленина, дом 30, mks10@tpu.ru

Координация основания Льюиса на электрон-дефицитную область электронной оболочки атома галогена представляет собой невалентное взаимодействие, называемое галогенной связью. Галогенная связь за счет своей селективности и гидрофобности находит свое применение в таких областях как катализ, дизайн лекарственных средств, химия материалов и также многих других [1].

Изменяя структуры тектонов, способных вступать в невалентные взаимодействия такого типа, можно контролировать мотив формируемых синтонов, изменяя тем самым итоговую кристаллическую структуру получаемых образцов. Взаимное расположение соединений с неспаренным электроном – нитронил-нитроксильных радикалов – в кристаллической решетке является одним из ключевых факторов, опреде-

ляющим магнитные свойства получаемых материалов [2].

Для исследования влияния положения донора галогенной связи на кристаллическую упаковку, нами были получены и выделены радикалы **1** и **2** (Схема 1). Как мы предположили, иодэтинильная группа будет формировать короткий контакт с атомом кислорода радикального центра, и таким образом будут получены молекулы, обладающие свойствами как донора, так и акцептора галогенной связи.

Радикал **1** кристаллизовался в системах ацетонитрил/дихлорметан, ацетонитрил/дихлорметан/толуол и декалин/дихлорметан. Во всех случаях, несмотря на несколько различную форму кристаллов, все они были сформированы на основе идентичных элементарных ячеек (Схема 2), в которой наблюдается формирование коротких контактов между атомами кислорода

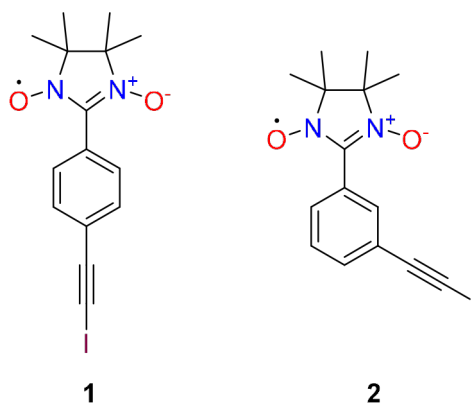


Схема 1. Исследуемые нитронил-нитроксильные радикалы

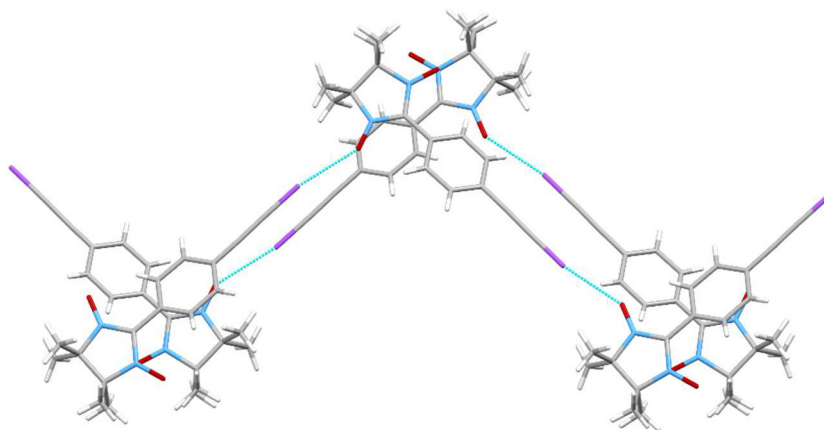


Схема 2. Кристаллическая решетка в образце радикала 1

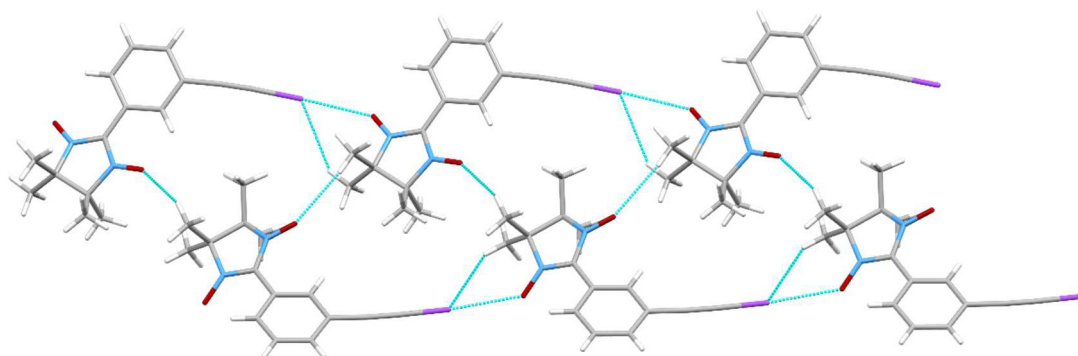


Схема 3. Кристаллическая решетка в образце радикала 2

радикального центра и иодом иодэтильной группы:  $\angle C-I \cdots O = 168,17(14)^\circ$ ,  $N_c = 0,82$  [3].

Кристаллизация радикала 2 в смеси гептан/дихлорметан и декалин/дихлорметан также позволила получить короткие контакты между атомами кислорода радикального центра и атомом иода:  $\angle C-I \cdots O \in [173,38(13)^\circ; 176,77(12)^\circ]$ ,  $N_c \in [0,83; 0,84]$  [3] (Схема 3).

Таким образом, были получены нитронил-нитроксильные радикалы, обладающие

свойствами как донора, так и акцептора галогенной связи. Полученные данные лягут в основу дальнейших исследований органических магнитных материалов на основе стабильных радикалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 22-73-00077 <https://rscf.ru/project/22-73-00077/>.

## Список литературы

1. *Metrangolo P., Resnati G. Halogen Bonding I. // Topics in Current Chemistry. – Vol. 358.*
2. *Hicks R. G. (Robin G. Stable radicals: fundamentals and applied aspects of odd-electron compounds. Wiley-Blackwell, 2010. – P. 588.*
3. *Bondi A. Van der waals volumes and radii // Journal of Physical Chemistry. American Chemical Society, 1964. – Vol. 68. – № 3. – P. 441–451.*

## СИНТЕЗ ЭПОКСИИЗОИНДОЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ (ТИО, СЕЛЕНО)МОЧЕВИННЫЙ ФРАГМЕНТ, С ПОМОЩЬЮ РЕАКЦИИ IMDAF

Д. М. Щевников, Д. Ф. Мерцалов, Л. В. Ловцевич

Научный руководитель – к.х.н., доцент кафедры органической химии ФФМиЕН РУДН В. П. Зайцев

Российский Университет Дружбы Народов

117198, Россия, Москва, ул. Миклухо-Маклая, shchevnikov.dm@gmail.com

Исследования в области производных мочевины, тиомочевины, селеномочевины занимают огромную нишу в органической, фармацевтической и лечебной химии, поскольку известно огромное количество лекарственных средств, пищевых добавок, вспомогательных соединений, используемых в промышленности, содержащих скелеты этих молекул. (Тио, селено)мочевины привлекают внимание благодаря своей высокой противоопухолевой активности и, в то же время, приемлемо низкой цитотоксично-

сти. Они используются в качестве противомикробных и антибактериальных средств широкого спектра действия, а важность мочевинового фрагмента в качестве пестицидов, фунгицидов и бактерицидных средств давно известна. Фенурон **А** (гербецид сплошного действия) и амбазон **Б** (средство профилактического лечения тонзилита) являются отличными примерами наличия подобных скелетов в биологически активных соединениях различной направленности, а такое соединение как эбселен **В**, использующийся в

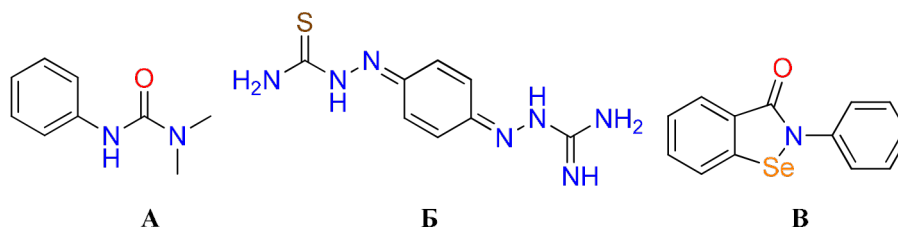
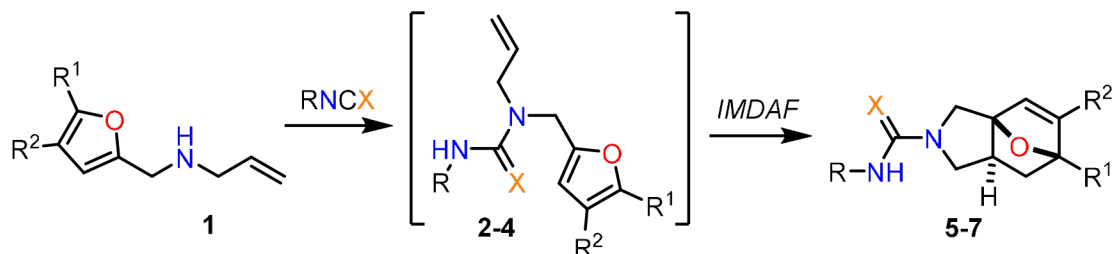


Схема 1.



R = Ar, Alk; R<sup>1</sup> = H, Alkyl, Ar, Hal; R<sup>2</sup> = H, Me, Br; X = O, S, Se

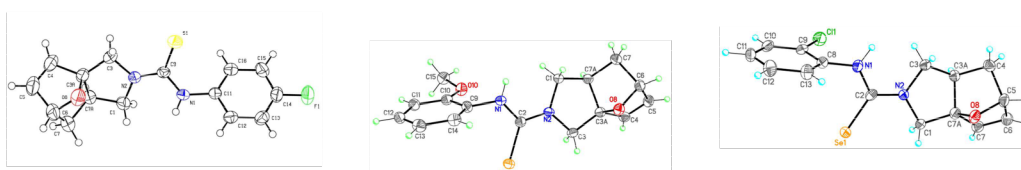


Схема 2.