

ПОЛУЧЕНИЕ АЗОТ-СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ λ^5 -ИОДАНОВ

Н. С. Антонкин, Ю. А. Власенко

Научный руководитель – д.х.н., профессор П. С. Постников

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, nsa14@tpu.ru

Соединения гипервалентного иода (СГИ) известны в органической химии как более безопасные и экологичные аналоги реагентов на основе переходных металлов в окислительных превращениях [1]. Одним из важнейших классов СГИ являются органические производные пятивалентного иода – λ^5 -иоданы, которые наиболее известны как селективные и мягкие окислители для спиртов, аминов и фенолов. Кроме того, они находят и более широкое синтетическое применение во многих окислительных превращениях и циклизациях [2, 3].

Несмотря на существенные преимущества λ^5 -иоданов их малая растворимость в воде и органических растворителях, так и потенциальная взрывоопасность, ограничивают применение этих реагентов в органическом синтезе. Данные недостатки делают разработку новых производных пятивалентного иода актуальной задачей в химии СГИ. Основные усилия в модификации λ^5 -иоданов, направленные на улучшение их фи-

зико-химических свойств, в том числе стабильности и растворимости, были сосредоточены на получении производных, в которых иод связан с кислородными лигандами (Рис. 1, а).

Несмотря на значительные успехи в разработке новых *O*-координированных производных пятивалентного иода существующие реагенты всё ещё имеют ограничения с точки зрения реакционной способности и демонстрируют недостатки, связанные с их физическими свойствами, например, являются неустойчивыми в присутствии влаги. Совсем недавно было показано, что азотные бипиридиновые лиганды могут оказывать существенное влияние на λ^5 -иоданы увеличивая их растворимость и приводя к уникальной реакционной способности, позволяя, например, окислять электронодефицитные фенолы [4] (Рис. 1, б). Принимая во внимание наш опыт в разработке *N*-координированных СГИ на основе (2-иодофенил)азолов [5–7] мы считаем, что использование аналогичного подхода для полу-

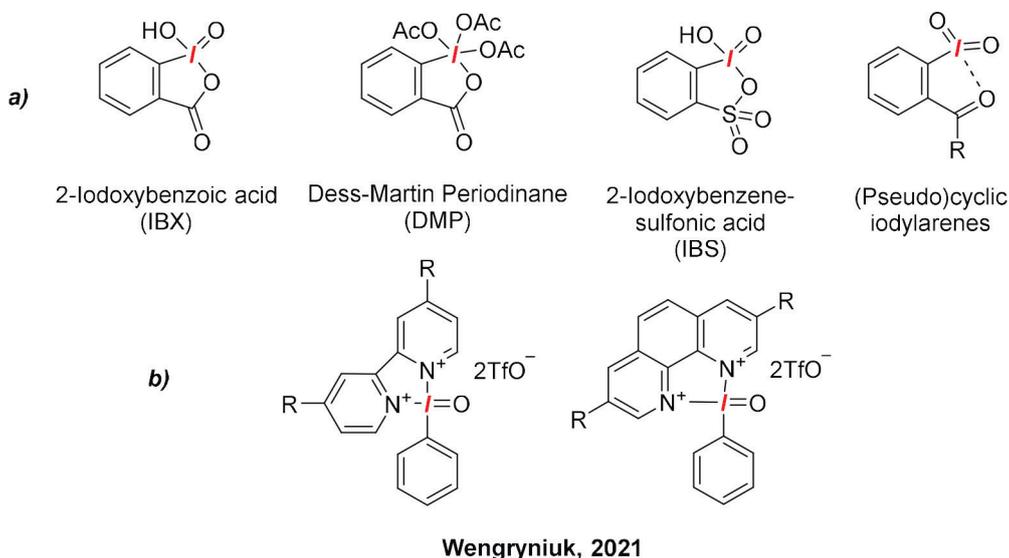


Рис. 1. а) Примеры типичных *O*-стабилизированных или *O*-координированных λ^5 -иоданов; б) λ^5 -иоданы с азотными лигандами

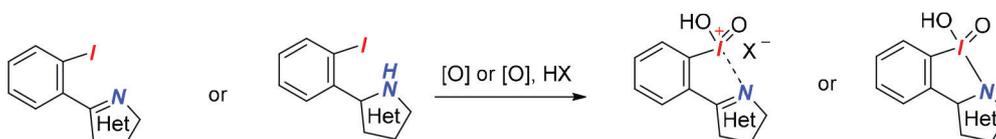


Рис. 2. Схема получения *N*-стабилизированных λ^5 -иоданов

чения *N*-координированных λ^5 -иоданов является весьма перспективным.

Таким образом в ходе данной работы был разработан метод получения *N*-координированных циклических и (псевдо)циклических λ^5 -иоданов на основе (2-иодофенил)азолов, наработан

широкий ряд данных соединений, изучены их структура и реакционная способность (Рис. 2).

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-585 (Мегагрант).

Список литературы

1. Yoshimura A., Zhdankin V. V. // *Chem. Rev.*, 2016. – V. 116. – № 5. – P. 3328–3435.
2. Zhdankin V. V. // *J. Org. Chem.*, 2011. – V. 76. – № 5. – P. 1185–1197.
3. Venkata Durga Nageswar Y., Ramesh K., Rakhi K. // *Front. Chem.*, 2022. – V. 10. – P. 841751.
4. Xiao X., Roth J. M., Greenwood N. S., Velopolecek M. K., Aguirre J., Jalali M., Ariaifard A., Wengryniuk S. E. // *J. Org. Chem.*, 2021. – V. 86. – № 9. – P. 6566–6576.
5. Vlasenko Y. A., Postnikov P. S., Trusova M. E., Shafir A., Zhdankin V. V., Yoshimura A., Yusubov M. S. // *J. Org. Chem.*, 2018. – V. 83. – № 19. – P. 12056–12070.
6. Boelke A., Vlasenko Y. A., Yusubov M. S., Nachtsheim B. J., Postnikov P. S. // *Beilstein J. Org. Chem.*, 2019. – V. 15. – P. 2311–2318.
7. Vlasenko Y. A., Kuczmera T. J., Antonkin N. S., Valiev R. R., Postnikov P. S., Nachtsheim B. J. // *Adv. Synth. Cat.*, 2023. – V. 365. – № 4. – P. 535–543.

ПРОЕКТИРОВАНИЕ БАЗЫ ДАННЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Л. А. Аракелян, К. С. Егорова, В. П. Анаников

Научный руководитель – д.х.н., академик, заведующий лабораторией металлокомплексных и наноразмерных катализаторов В. П. Анаников

ФГБУН Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН
119991, Россия, г. Москва, Ленинский проспект, 47, liana9991@ioc.ac.ru

Ионные жидкости представляют собой ионные и солевые вещества в жидком состоянии с температурой плавления ниже 100 °С, обычно образованные крупными органическими катионами с делокализованным зарядом и органическими/неорганическими анионами, которые слабо координированы с органическим катионом [1]. В последнее время они привлекли большое внимание благодаря своим замечательным физико-химическим свойствам, таким как термическая стабильность, низкое или незначительное давление паров, негорючесть, нелетучесть, электрохимическая стабильность и благоприятные сольватирующие свойства для широкого спектра полярных и неполярных веществ [2].

Несмотря на все преимущества ионных жидкостей, следует отметить, что расширение промышленного производства и применения этих соединений, вероятно, вызывает стойкие загрязнения и представляет опасность для окружающей среды [3]. ИЖ, иногда называемые «зелеными растворителями», не являются внутренне безопасными, поскольку некоторые из них на самом деле довольно токсичны, но их можно

спроектировать так, чтобы они были экологически безопасными [4].

Любая биологическая активность/свойство химического вещества (Φ) является функцией его химического состава (C) следующей формулой 1.

$$\Phi = f(C) \quad (1)$$

Биологическая активность ИЖ проявляется через способность легко растворяться в воде, в липидном бислое клетки. Благодаря структурным особенностям, касающимся длины и разветвленности алкильной цепи, а также наличие гидроксильной группы (в качестве противоиона), которая увеличивает площадь полярной поверхности катионной головки, может привести к повышению токсичности.

В настоящее время количественные соотношения структура-активность/свойство (QSAR/QSPR) успешно используются в качестве хорошей альтернативы для получения информации, подходящей для молекулярного дизайна и медицинской химии [5]. Для описания взаимосвязи структуры и свойства используются QSAR модели. QSAR это математическая ин-