

## СИНТЕЗ И СТРУКТУРА 1-(4-МЕТИЛБЕНЗОЛСУЛЬФОНИЛ)-2-ГИДРОКСИМЕТИЛБЕНЗИМИДАЗОЛА

К. Б. Абдиреймов<sup>1</sup>, Р.М. Усманов<sup>2</sup>, Д. Р. Матчанова<sup>2</sup>, Р. Я. Окманов<sup>3</sup>

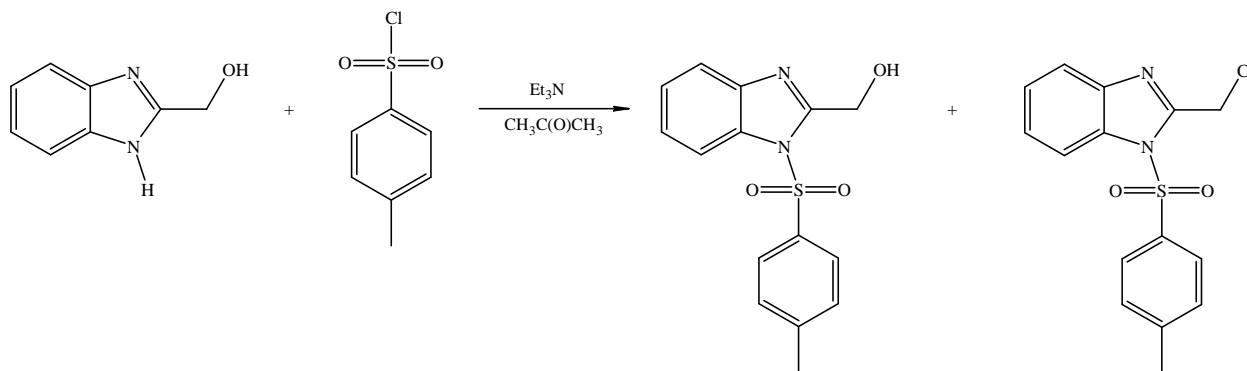
- 1) Каракалпакский Государственный университет,
- 2) Ургенчский государственный университет,
- 3) Институт химии растительных веществ имени акад.

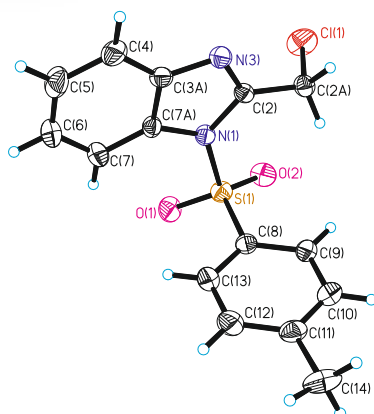
**Ключевые слова:** Кристаллическая структура, межмолекулярное взаимодействие, 1-арилсульфонил-2-гидроксиметилбензимидазолы, 1-арилсульфонил-2-хлорметилбензимидазолы, арилсульфонилирование, рентгеноструктурная анализ

Производные бензимидазола являются важным классом гетероциклических соединений, благодаря разнообразию фармакологического активности [1], из которых найдены средства применяющихся в терапии как антигипертензивное, противовоспалительное, антимикробное, противовирусное, антиоксидантное и другие средства [2].

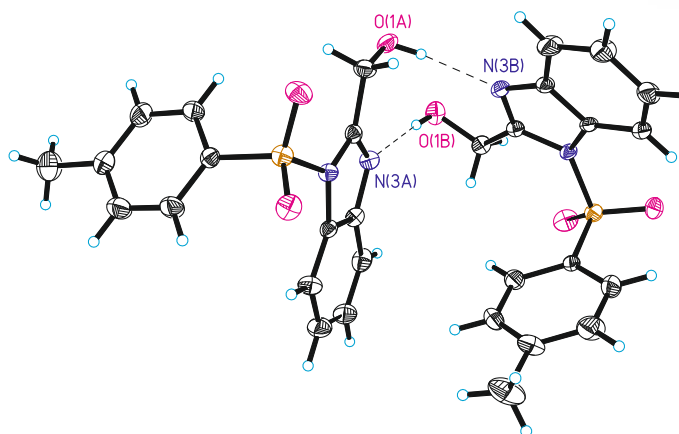
Ранее было обнаружено, что в реакции 1-гидроксиметилбензимидазола с арилсульфонилхлоридами получается 1-арилсульфонилбензимидазолы, которые образуются деформилированием исходного соединения [3]. Однако при реакции 2-гидроксиметилбензимидазола с арилсульфонилхлоридами в присутствии триэтиламина получают смеси 1-арилсульфонил-2-гидроксиметилбензимидазолов и 1-арилсульфонил-2-хлорметилбензимидазолов [4]. Смеси продуктов были разделены с помощью колоночной хроматографии и получены кристаллы индивидуальных веществ.

В настоящей работе анализируется строения 1-(4-метилбензолсульфонил)-2-гидроксиметилбензимидазола и 1-(4-метилбензолсульфонил)-2-хлорметилбензимидазола [4] на основании результатов РСА (рис.1).





1-(4-метилбензолсульфонил)-2-хлорметилбензимидазол [4]



1-(4-метилбензолсульфонил)-2-гидроксиметилбензимидазол  
Образования димера «встречными» Н-связями О—Н...N.

Рис.1. Асимметрическая часть кристаллических структур

Как видно из рисунка в асимметрической части кристаллической структуры 1-(4-метилбензолсульфонил)-2-гидроксиметилбензимидазола состоит из двух независимых молекул (**A** & **B**). В целом молекула состоит из двух плоских фрагментов бензимидазольного и бензольного колец, углы между плоскими фрагментами составляет  $83.2(2)^\circ$  для **A** и  $81.2(2)^\circ$  для **B**, а для 1-(4-метилбензолсульфонил)-2-хлорметилбензимидазола составляла  $89.2(3)^\circ$ . Пространственное расположение бензимидазольных и бензолных фрагментов в 1-(4-метилбензолсульфонил)-2-гидроксиметилбензимидазола в молекулах **A** и **B** незначительно отличается. Это означает что фрагменты отличается расположением по связи N1–S1 и S1–C8 (табл.1).

Таблица 1.

Торсионные углы вокруг связи N1–S1 и S1–C8

Связи	Углы для <b>A</b>	Углы для <b>B</b>
C2–N1–S1–C8	90.3 (5)	-87.96 (5)
C2–N1–S1–O3	-154.4 (4)	157.6 (4)
N1–S1–C8–C9	-74.8 (5)	75.6 (5)
N1–S1–C8–C13	103.1 (5)	-102.2 (5)

В кристаллической структуре 1-(4-метилбензолсульфонил)-2-хлорметилбензимидазола наблюдались слабые межмолекулярные водородные связи типа C—H...Cl. В 1-(4-метилбензолсульфонил)-2-гидроксиметилбензимидазола наблюдается образования димера «встречными» Н-связями типа О—Н...N (рис.1). Параметры этих Н-связей следующие: расстояния O1A—H 0.83 (3), H...N3B 2.03 (3), O1A...N3B 2.857 (6) Å и угол O1A—H1A...N3B  $172(6)^\circ$ ; расстояния O1B—H 0.80 (3), H...N3A 2.10 (3), O1B...N3A 2.895 (6) Å и угол O1B—H1B...N3A  $175(6)^\circ$ .

Таким образом, в кристаллических структурах 1-(4-метилбензолсульфонил)-2-гидроксиметилбензимидазола и 1-(4-метилбензолсульфонил)-2-хлорметилбензимидазола различается расположением плоских фрагментов вокруг связи N1–S1 и S1–C8, а также участием гидроксильных групп и атома хлора в межмолекулярных взаимодействиях.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Keri R.S., Hiremathad A., Budagumpi S., & Nagaraja B.M. (2015). Comprehensive review in current developments of benzimidazole-based medicinal chemistry. *Chemical biology & drug design*, 86(1), 19-65.
2. Bansal Y., & Silakari O. (2012). The therapeutic journey of benzimidazoles: A review. *Bioorganic & medicinal chemistry*, 20(21), 6208-6236.
3. Abdireimov K.B., Mukhamedov N.S., Aiybetov M.Z., & Shakhidoyatov K.M. (2012). Benzazoles 5. Synthesis and arylsulfonation of 1-hydroxymethylbenzimidazole. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 48, 458-461.
4. Abdireimov K.B., Mukhamedov N.S., Okmanov R.Y., Aiybetov M.Z., Tashkhodzhaev B., & Shakhidoyatov K.M. (2013). Benzazoles. 6. Synthesis and Arylsulfonation of 2-Hydroxymethylbenzimidazole. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 49, 760-765.