СИНТЕЗ 3-(ПИПЕРИДИН-4-ИЛ)-6,7-ДИГИДРО-5*H*-ПИРРОЛО[2,1-*c*][1,2,4]ТРИАЗОЛА И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТАУТОМЕРИИ ГИДРАЗОН–ГИДРАЗИН ПРОМЕЖУТОЧНОГО ПРОДУКТА ГИДРАЗОНИРОВАНИЯ[1]

Q.-Z. Zhang[a, *], C.-F. Wan[a], Yu-Ma[a], N.-N. Qin[a], C.-Y. Ke[a], Q. Pan[b], and X.-L. Zhang[a, **]

[a] *College of Chemistry and Chemical Engineering, Xi'an Shiyou University, Xi'an, 710065 China*
*e-mail: *qzzhang@xsyu.edu.cn; **xlzhang@xsyu.edu.cn*

[b] *Department of Pharmacy, School of Medicine, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710061 China*

Received August 13, 2018; revised May 14, 2019; accepted May 31, 2019

3-(Пиперидин-4-ил)-6,7-дигидро-5*H*-пирроло[2,1-*c*][1,2,4]триазол синтезирован с общим выходом 39% по четыре стадии, включающая этерификацию, гидразонирование, циклизацию и восстановление. Синтезированное соединение был охарактеризовано с помощью спектроскопии ПМР и тандемной масс-спектрометрии с ионизацией электрораспылением. Квантово-химическим методом теории функционала плотности B3LYP/6-311+G(*d,p*) исследованы молекулярные структуры бензилового эфира (*Z*)-4-[2-(пирролидин-2-илиден)гидразин-1-карбонил]пиперидин-1-карбоновой кислоты и ряда родственных соединений. Согласно результатам расчетов, более стабильными являются гидразонные таутомеры.

Ключевые слова: 1,2,4-триазол; фармацевтический прекурсор; таутомерия гидразон–гидразин; теория функционала плотности.

DOI: 10.1134/S0514749219080287

[1] Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.