**Циклоокт-3-ин-1,6-дисульфон: перспективный реагент для реакции SPAAC**

***Зонов Р.В., Исомиддинов Ж.К., Лемпорт П.С., Ненайденко В.Г.***

*Студент, 4 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* *roman.zonoff@yandex.ru*

SPAAC является перспективным некаталитическим вариантом [3+2]-азид-алкинового циклоприсоединения, промотируемым внутренним напряжением циклического алкина [1]. Методы синтеза таких соединений постоянно совершенствуются [2]. Ключевым вызовом в данном направлении является поиск короткостадийного синтеза такого циклического алкина, который сочетал бы высокую реакционную способность наряду со стабильностью.

Нами разработан эффективный метод синтеза циклоокт-3-ин-1,6-дисульфона (схема 1), являющегося устойчивым веществом с высокой температурой разложения.



Схема 1. Синтез и молекулярная структура циклоокт-3-ин-1,6-дисульфона **1**

Реакционная способность **1** была исследована нами на примере широкого круга азидов, включая диазиды с линкерами различной длины и природы (схема 2).

Схема 2.Реакции **1** с органическими азидами

Оказалось, что циклоалкин **1** является водорастворимым соединением, реакционная способность которого достаточна для осуществления реакций SPAAC в водных средах при температурах около 37оС. В данном случае в качестве органических азидов могут выступать азидопроизводные карбоновых и дикарбоновых кислот, которые могут быть синтезированы на основе соответствующих аминокислот, например, глицина и лизина.

 Нами были проведены квантово-химические расчёты, а также для ряда азидов с применением 1H ЯМР спектроскопии экспериментально определены барьеры активации реакции с циклоалкином **1** в различных растворителях. Расчётные значения находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22-23-00155).*

**Литература**

1. Harris T., Alabugin I.V. Strain and stereoelectronics in cycloalkyne click chemistry. // Mendeleev Commun. 2019. Vol. 29. P. 237–248.

2. Danilkina N.A. et al. Heterocycloalkynes Fused to a Heterocyclic Core: Searching for an

Island with Optimal Stability-Reactivity Balance. // J. Am. Chem. Soc. 2021. Vol.143. P. 16519−16537.