

ARE WE ABLE TO PREDICT OPTIMAL CONDITIONS FOR SELECTIVE DEPROTECTION REACTIONS?

Oleg Elmehrik¹, Arkadi I. Litvin^{1,2}, Timur I. Madzhidov², Igor Antipin¹,
Alexandre Varnek¹

¹ Université de Strasbourg, Strasbourg, France,
² Kazan Federal University, Kazan, Russia

Protection/deprotection reactions play an important role in synthetic organic chemistry. A key problem is to choose optimal experimental conditions (catalyst, solvent, additives, etc) leading to selective deprotection of a given group in particular environment. Up to now, for this purpose chemists use reactivity charts from a famous the Green's book [1] which has become a recognized guide in protection/deprotection chemistry. On the other hand, these reactivity charts resulted from manual analysis of relatively small amount of data and therefore may miss important information hidden in large reaction databases.

In this presentation we report statistical analysis of large dataset of hydrogenation reactions (142,111 reactions) extracted from Reaxys database. For this purpose, we built a workflow involving numerous *in-house* tools for reaction data processing based on the Condensed Graph of Reaction (CGR) approach [2]. Raw reaction data were curated, normalized and annotated thus forming well-structured database. Its analysis clearly shows some disagreements with the Green's reactivity charts in respect to (i) reactivity of particular protective groups and (ii) selectivity of deprotection of a given group in presence of other groups or chemical functions.

We have developed a prototype of an expert system able to provide chemist with detailed recommendations of experimental conditions leading to desirable chemical transformations. This tool implements CGR-based similarity searching to the reaction database issued from raw data processing and could be easily implemented in any database system

1. Peter G. M. Wuts, Theodora W. Greene Greene's Protective Groups in Organic Synthesis / Edition 4, Wiley, 2006
2. Varnek A., Fourches D., Hoonakker F., Solov'ev V.P. // J. Comput. Aided. Mol. Des. 2005, 19, 693 – 703.

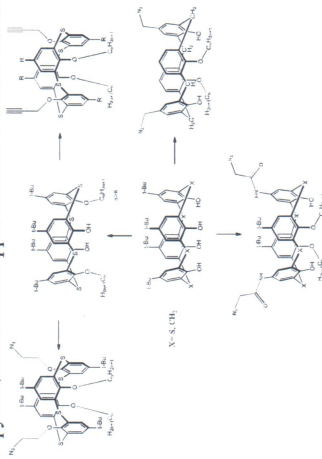
НОВЫЕ ПРЕКУРСОРЫ КЛИК РЕАКЦИЙ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ (ТИА)КАЛИКСАРЕНА: СИНТЕЗ, КЛИК-РЕАКЦИИ И ИММОБИЛИЗАЦИЯ НА ВЕЗИКУЛАХ DOPC

В.А. Бурлаков^{1*}, Р.Р. Ибрагимов¹, Г.А. Фатыхова¹, Д.А. Миронова¹, С.Е. Соловьева^{1,2}, И.С. Антипин^{1,2}

¹ ФГАОУ ВПО «Казанский (Приволжский) федеральный университет» 420008, Казань, ул. Кремлевская, д.18, ultrav@bk.ru

² ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, 420088, Казань, ул. Арбузова, д. 80

Одним из успешно развивающихся разделов химии макроциклов в последние десятилетия является химия каликсаренов и их серосодержащих аналогов – тиакаликсаренов. Производные каликсаренов с функциональными заместителями различной природы представляют большой интерес, поскольку наличие таких групп по разные стороны плоскости макроцикла позволяет получить молекулы, обладающие комплексом функций: распознаванием различных субстратов с одной стороны и способностью к связыванию с поверхностью различных носителей. Развитие подходов клик-химии позволяет существенно расширить потенциал применения данных макроциклов за счет присоединения любых необходимых функциональных фрагментов в очень мягких условиях.



В представленной работе отработаны методики синтеза новых амфифильных азид/алкин содержащих производных классического и тиакаликсарена в различных стереоизомерных формах а также получены триазол-содержащие продукты с различными функциональными группами. Некоторые из синтезированных триазолов использованы в функционализации фосфолипидных везикул с целью создания "гибких" рецепторов для распознавания объемных биосубстратов.

Благодарим за финансовую поддержку грант РФФ № 14-13-01151.