



**KOST**

**ВСЕРОССИЙСКИЙ КОНГРЕСС  
по химии гетероциклических соединений**



**СБОРНИК ТЕЗИСОВ**

**12.10.2021 – 16.10.2021**

**г. Сочи**

[www.kost2020.ru](http://www.kost2020.ru)

## ГЕНЕРАЛЬНЫЕ СПОНСОРЫ

**ГАЛАХИМ**  
+7 (495) 151-01-50  
mailbox@galachem.ru  
www.galachem.ru

Все для Вашей Лаборатории  
Надежность. Сервис. Качество.

- аналитические приборы
- лабораторное стекло
- фотореакторы
- лабораторное оборудование
- химические реактивы
- электросинтез
- все для хроматографии
- проточные реакторы
- мебель

**METTLER TOLEDO**  
Профессиональные эффективные решения  
для современных лабораторий

Лабораторное взвешивание  
Аналитические приборы  
Автоматизированные реакторы и анализ *In situ*  
Программное обеспечение

METTLER TOLEDO СНГ • Тел.: (800) 777 70 77 • www.mt.com • info@mt.com



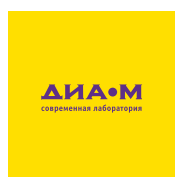
## ЗОЛОТОЙ СПОНСОР

**IKA®**

## ЭКСПОНЕНТЫ



## ПРИ ПОДДЕРЖКЕ



**ЦВЕТХРОМ®**

ПРИ ТЕХНИЧЕСКОЙ  
ПОДДЕРЖКЕ



ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЙ ОПЕРАТОР КОНГРЕССОВ  
[WWW.MESOL.RU](http://WWW.MESOL.RU)



# СБОРНИК ТЕЗИСОВ

*Всероссийский конгресс  
по химии гетероциклических соединений  
«KOST-2021»*

г. Сочи  
12 - 16 октября 2021 года

**ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ****Председатели**

Белецкая И.П., академик РАН (Москва)

Егоров М.П., академик РАН (Москва)

**Члены программного комитета**

Аксенов А.В. (Ставрополь)

Анаников В.П. (Москва)

Антипин И.С. (Казань)

Багрянская Е.Г. (Новосибирск)

Бакулев В.А. (Екатеринбург)

Балова И.А. (Санкт-Петербург)

Бачурин С.О. (Черноголовка)

Бубнов Ю.Н. (Москва)

Черкасов В.К. (Нижегород)

Горбунова Ю.Г. (Москва)

Громов С.П. (Москва)

Джемилев У.М. (Уфа)

Иванов А.В. (Иркутск)

Карасик А.А. (Казань)

Климочкин Ю.Н. (Самара)

Койфман О.И. (Иваново)

Коновалов А.И. (Казань)

Кучин А.В. (Сыктывкар)

Кукушкин В.Ю. (Санкт-Петербург)

Минкин В.И. (Ростов-на-Дону)

Мионов В.Ф. (Казань)

Музафаров А.М. (Москва)

Ненайденко В.Г. (Москва)

**Члены программного комитета**

Нефедов О.М. (Москва)

Нифантьев Н.Э. (Москва)

Новаков И.А. (Волгоград)

Овчаренко В.И. (Новосибирск)

Пономаренко С.А. (Москва)

Русинов В.Л. (Екатеринбург)

Тартаковский В.А. (Москва)

Терентьев А.О. (Москва)

Трифонов А.А. (Москва)

Трофимов Б.А. (Иркутск)

Салахутдинов Н.Ф. (Новосибирск)

Салоутин В.И. (Екатеринбург)

Синяшин О.Г. (Казань)

Стороженко П.А. (Москва)

Сысолятин С.В. (Бийск)

Федюшкин И.Л. (Нижегород)

Федоров А.Ю. (Нижегород)

Фисюк А.С. (Омск)

Чарушин В.Н. (Екатеринбург)

Чупахин О.Н. (Екатеринбург)

Щекотихин А.Е. (Москва)

Юнусов М.С. (Уфа)

Юсубов М.С. (Томск)

**ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ****Председатель**

Ненайденко В.Г., профессор (Москва)

**Зам. председателя**

Белоглазкина Е.К., профессор (Москва)

**Члены организационного комитета**

Ворожцов Н.И., доцент (Москва)

Волкова Т.Б., к.х.н. (ООО «МЕКОЛ»)





# ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

# УГЛЕРОДНЫЙ БАЛАНС И УГЛЕРОД-НЕЙТРАЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В СОВРЕМЕННЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ И РАЗРАБОТКАХ

[Анаников В.П.](#)

*Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского, Российская академия наук,  
 Ленинский проспект 47, г. Москва; <http://AnanikovLab.ru>  
 E-mail: [val@ioc.ac.ru](mailto:val@ioc.ac.ru)*

Необходимость обеспечения устойчивого развития (sustainable development) имеет ключевое значение на современном этапе развития научных исследований в области органической химии, катализа и промышленных технологий. Замена ископаемого сырья на возобновляемые источники и создание безотходных технологий становятся все более востребованными (рис. 1).

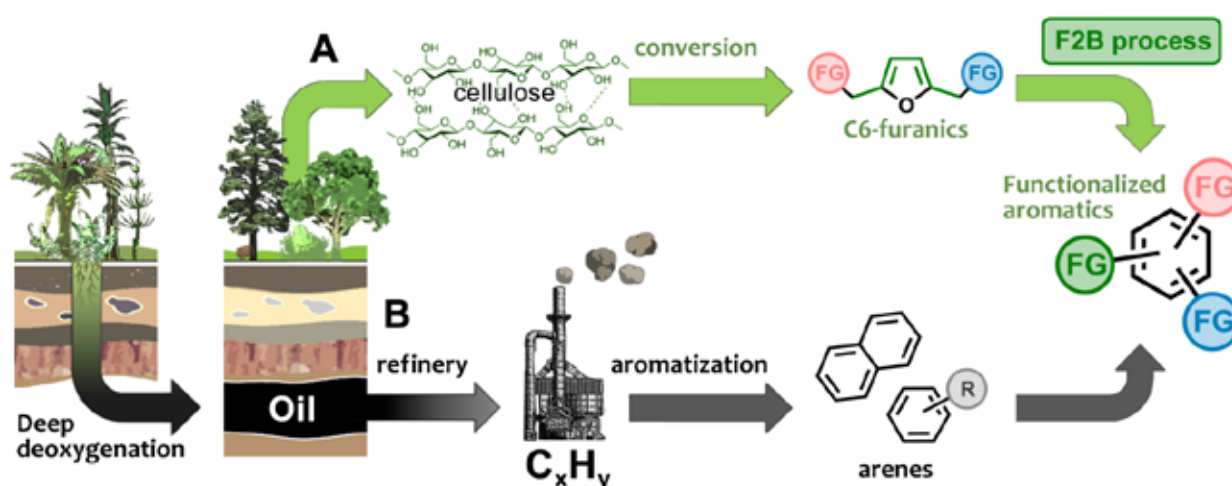


Рис. 1 Органический синтез на основе возобновляемого (А) и ископаемого (В) сырья [1].

В настоящем докладе рассматриваются вопросы углеродного баланса, углерод-нейтральных технологий, конверсии природной биомассы в фурановые производные [2,3], рециклизации углерод-содержащих отходов [4], развития аддитивных технологий на базе химической конверсии биомассы [5] и создания регенерируемых материалов [6].

## Литература

- [1] Kucherov F.A., Romashov L.V., Averochkin G.M., Ananikov V. P., *ACS Sustainable Chem. Eng.*, **2021**, 9, 8, 3011-3042.
- [2] Galkin K.I., Krivodaeva E.A., Romashov L.V., Zalesskiy S.S., Kachala V.V., Burykina J.V., Ananikov V. P., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, 55, 8338-8342.
- [3] Kucherov F.A., Romashov L.V., Galkin K.I., Ananikov V.P., *ACS Sustainable Chem. Eng.*, **2018**, 6, 8064-8092.
- [4] Rodygin K.S., Vikenteva Yu.A., Ananikov V. P., *ChemSusChem*, **2019**, 12, 1483-1516.
- [5] Kucherov F.A., Gordeev E.G., Kashin A.S., Ananikov V. P., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, 56, 15931 –15935.
- [6] Metlyaeva S.A., Rodygin K.S., Lotsman K.A., Samoylenko D.E., Ananikov V.P., *Green Chem.*, **2021**, 23, 6, 2487-2495.

# КАТАЛИЗ В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Белецкая И.П.

*Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова,  
Химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы 1с3,  
e-mail: beletskaja@org.chem.msu.ru*

На примере реакций кросс-сочетания и присоединения к кратным связям с образованием связей углерод-углерод и углерод-гетероатом (N, S, Se, P, O, Si, B) будут рассмотрены изменения, произошедшие в области металлокомплексного катализа: переход от катализа палладием к катализу медью и другими дешевыми и менее токсичными металлами, гетерогенизация комплексов металлов на разных подложках, а также новые пути синтеза (реакция Chan–Lam–Evans, функционализация аренов и гетероаренов с активацией связи C–H, фотокатализ).

*Работа подготовлена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-13-00223.*



# КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ



# ТИАКАЛИКСАРЕНЫ: ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОЙ ПЛАТФОРМЫ ДЛЯ КОНСТРУИРОВАНИЯ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Антипин И.С.<sup>а,б</sup>, Бурилов В.А.<sup>а</sup>, Овсянников А.С.<sup>а,б</sup>, Муравьев А.А.<sup>б</sup>, Соловьёва С.Е.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008, Казань, ул. Кремлевская, д. 29/1

<sup>б</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, 420088, Казань, ул. Арбузова, д. 8.

e-mail: evgersol@yandex.ru

В докладе будут представлены основные подходы к стерео и хемоселективной функционализации тиакаликс[4]ареновой платформы, которые позволяют существенно изменить гидрофильно-липофильные свойства макроциклов и повысить эффективность и селективность взаимодействия с различными субстратами<sup>1-8</sup>.

Будут обсуждены закономерности комплексообразования (тиа)каликс[4]аренов с субстратами различной природы: неэлектролитами, катионами, анионами, а также самосборки амфифильных производных для создания различных супрамолекулярных и наносистем, устройств и «умных» материалов.

## Литература

1. S.E.Solovieva, V.A.Burilov, I.S.Antipin, *Macroheterocycles*, **2017**, 10, 134-146.
2. V.A. Burilov, G.A. Fatikhova, M.N. Dokuchaeva, R.I. Nugmanov, D.A. Mironova, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, S.E.Solovieva, I.S.Antipin. *Beilstein J. Org. Chem.* **2018**, 14, 1980–1993.
3. A.A.Muravev, S.E. Solovieva, F.B. Galieva, O.B. Bazanova, I.Kh. Rizvanov, K.A. Ivshin, O.N. Kataeva, S.E. Matthews, I.S. Antipin, *RSC Adv.*, **2018**, 8, 32765-32769.
4. V.Burilov, B.Gafiatullin, D.Mironova, E.Sultanova, V. Evtugyn, Yu.Osin, D.Islamov, K.Usachev, S.Solovieva and I.Antipin, *Eur J Org Chem.* **2020**, 2180-2189.
5. V.Burilov, R.Garipova, E.Sultanova D.Mironova, I.Grigoryev, S.Solovieva, I.Antipin, *Nanomaterials*, **2020**, 10, 1143.
6. A.Muravev, A.Yakupov, T.Gerasimova, R. Nugmanov, E. Trushina, O. Babaeva, G.Nizameeva, V.Syakaev, S. Katsyuba, S. Selektor, S Solovieva, I. Antipin, *Int. J. Mol. Sci.*, **2021**, 22, 3535.
7. A.Muravev, T.Gerasimova, R.Fayzullin, O.Babaeva, I.Rizvanov, A.Khamatgalimov, M.Kadirov, S.Katsyuba, I.Litvinov, Sh.Latypov, S.Solovieva, I.Antipin, *Int. J. Mol. Sci.*, **2020**, 21, 6916.
8. V. Burilov, R. Garipova, D. Mironova, E. Sultanova, I. Bogdanov, E. Ocherednyuk, V. Evtugyn, Y. Osin, I. Rizvanov, S. Solovieva, I. Antipin, *RSC Adv.*, **2021**, 11, 584–591.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 19-13-00095.

# УДИВИТЕЛЬНАЯ ХИМИЯ ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ – ПРОИЗВОДНЫХ ФОСФОРА(V)

[Горбунова Ю.Г.](#)<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект 31,  
e-mail: Yulia.gorbunova@gmail.com

<sup>б</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,  
119991, Москва, Ленинский проспект 31, корп.4

Тетрапиррольные макроциклические соединения и координационные соединения на их основе, являясь основой многих природных процессов давно нашли свое лидирующее место в науке, материаловедении и современных технологиях<sup>1-3</sup>. Основные исследования в этой химии посвящены комплексам переходных металлов и единичное количество работ, посвящено фосфору, самому маленькому катиону, образующему координационные соединения с тетрапиррольными лигандами. В докладе на примере комплексов фосфора (V) с порфиринами и фталоцианинами будут показаны подходы к разработке молекулярных переключателей, фотосенсибилизаторов для антимикробной терапии, температурных сенсоров<sup>4-7</sup>.

Особое внимание будет уделено недавно обнаруженному явлению обратимого переключения ароматичности во фталоцианинах фосфора (V)<sup>8</sup>. Стабильность ароматической системы фталоцианинов является общепринятой концепцией в химии этих макроциклов, но эта концепция больше не работает в случае электронодефицитного комплекса фосфора (V), который претерпевает уникальную обратимую реакцию нуклеофильного присоединения, приводящую к образованию неожиданно стабильного неароматического продукта с новыми свойствами.

## Литература

1. Koifman, O. I., Ageeva, T. A., Beletskaya Y.P. et al. *Macroheterocycles* 2020, **13** (4), 311–467.
2. Антипин И. С., Алфимов М. В., Арсланов В. В. и др. *Успехи химии*. 2021, **90**, (8), 895–1107.
3. Martynov, A.G., Safonova, E.A., Tsivadze, A.Y. *Coord. Chem. Rev.* 2019, **387**, 325–347.
4. Meshkov I. N., Bulach V., Gorbunova Y. G. et al. *Inorg. Chem.* 2016, **55**, 10774.
5. Meshkov I. N., Bulach V., Gorbunova Y. G. et al. *Chem. Commun.* 2017, **53** (71), 9918–9921.
6. Otvagin V.F., Kuzmina N.S., Krylova L.V. et al. *J. of Medicinal Chemistry*, 2019, **62**, 11182–11193.
7. Kolesnikov I. E., Kurochkin M. A., Meshkov I. N. et al. *Mater. Des.* 2021, **203**, 109613.
8. Kolomeychuk F.M., Safonova E.A., Polovkova M.A. *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, **143**, 14053–14058.

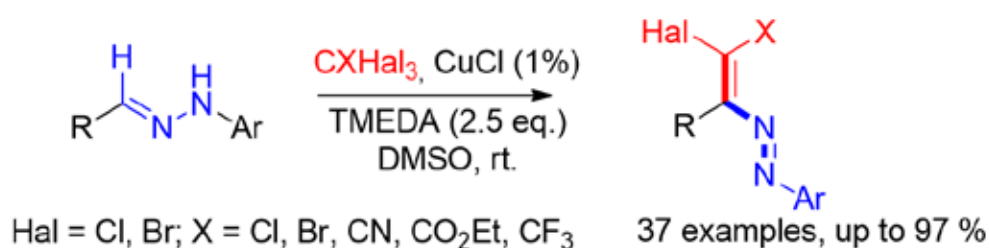
Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-13-00410).

# ДИХЛОРДИАЗАДИЕНЫ – НОВЫЙ СТРОИТЕЛЬНЫЕ БЛОКИ ДЛЯ ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИЙ

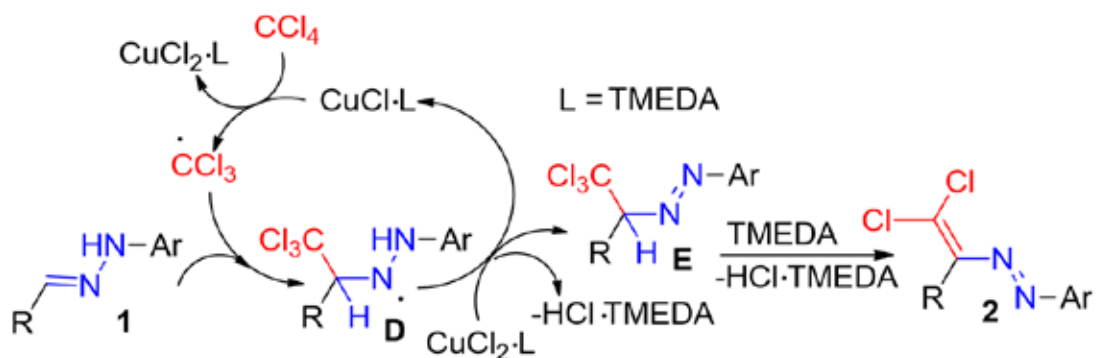
Ненайденко В.Г.

Московский государственный университет  
nenajdenko@gmail.com

Недавно мы обнаружили, что реакция с гидразонами, катализируемая солями меди, носит общий характер, и в ней могут участвовать N-замещенные гидразоны. В результате на основе взаимодействия N-монозамещенных гидразонов с полигалогеналканами мы разработали новую реакцию создания углерод-углеродных связей с образованием 1,2-диазбут-1,3-диенов. Это высокоэффективное превращение, катализируемое медью, обладает широкими синтетическими возможностями и позволяет проводить процесс в удобном одnoreакторном режиме, начиная с легкодоступных альдегидов и гидразинов.



Синтетическая значимость полученных галогенированных азидиенов была продемонстрирована в реакциях с O-, N-, S- и C-нуклеофилами, которые открыли доступ к ряду ценных ациклических и гетероциклических продуктов. Механистические исследования показали, что это катализируемое медью превращение происходит с участием радикальных интермедиатов. В настоящее время наша лаборатория проводит дальнейшие исследования по синтетическому применению полученных галогенированных азидиенов.



# ПИРАНОЗИД-ФУРАНОЗИДНАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА - НОВЫЙ ПРОЦЕСС В ХИМИИ УГЛЕВОДОВ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ В ОЛИГОСАХАРИДНОМ СИНТЕЗЕ

Нифантьев Н.Э., Крылов В.Б.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: nen@ioc.ac.ru*

Большой интерес к природным фуранозидсодержащим соединениям стимулирует разработку новых препаративных методов их химического синтеза. К ним относится недавно открытая нами<sup>1</sup> пиранозид-фуранозидная перегруппировка (ПФП) - не имеющий аналогов в органической химии процесс, позволяющий получать селективно О-замещенные фуранозиды из соответствующих пиранозидов. ПФП включает промотируемое кислотой исчерпывающее О-сульфатирование, сопровождающееся перегруппировкой, и последующее сольволитическое О-десульфатирование. В докладе будут рассмотрены результаты, полученные в ходе исследования ПФП включая: исследования механизма реакции,<sup>1</sup> её движущей силы,<sup>2</sup> субстрактных ограничений<sup>3</sup> и синтетических применений.<sup>4-9</sup> ПФП является полезным инструментом для получения сложных фуранозидсодержащих олигосахаридов, что продемонстрировано на примере синтеза олигосахаридов, родственных бактериальным и грибковым антигенным полисахаридам.

## Литература

1. Krylov V.B., Argunov D.A., Vinnitskiy D.Z., Verkhnyatskaya S.A., Gerbst A.G., Ustyuzhanina N.E., Dmitrenok A.S., Huebner J., Holst O., Siebert H.-C., Nifantiev N.E. *Chem. Eur. J.* 2014, 20, 16516.
2. Gerbst A.G., Krylov V.B., Argunov D.A., Dmitrenok A.S., Nifantiev N.E. *ACS Omega* 2019, 4, 1139.
3. Krylov V.B., Argunov D.A., Vinnitskiy D.Z., Gerbst A.G., Ustyuzhanina N.E., Dmitrenok A.S., Nifantiev N.E., Synlett 2016, 1659.
4. Argunov D.A., Krylov V.B., Nifantiev N.E., *Org. Biomol. Chem.* 2015, 13, 3255.
5. Argunov D.A., Krylov V.B., Nifantiev N.E., *Org. Lett.* 2016, 18, 5504.
6. Krylov V.B., Argunov D.A., Solovov A.S., Petruk M.I., Gerbst A.G., Dmitrenok A.S., Shashkov A.S., Latgé J.-P., Nifantiev N.E. *Org. Biomol. Chem.* 2018, 16, 1188.
7. Verkhnyatskaya S.A., Krylov V.B., Nifantiev N.E., *Eur. J. Org. Chem.* 2017, 710.
8. Argunov D.A., Trostianetskaia A.S., Krylov V.B., Kurbatova E.A., Nifantiev N.E. *Eur. J. Org. Chem.* 2019, 2019, 4226.
9. Laverde D., Romero-Saavedra F., Argunov D.A., Enotarpi J., Krylov V.B., Kalfopoulou E., Martini C., Torelli R., van der Marel G.A., Sanguinetti M., Codée J.D.C., Nifantiev N.E., Huebner J. *ACS Infect. Dis.* 2020, 6, 1816.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 19-73-30017.*



## NOVEL ORGANIC MAGNET

**[Victor Ovcharenko](#),<sup>a,b</sup> Aleksei Sheremetev,<sup>a</sup> Kirill Strizhenko,<sup>a</sup> Sergey Fokin,<sup>b</sup> Galina Romanenko,<sup>b</sup> Artem Bogomyakov,<sup>a,b</sup> Vitaly Morozov,<sup>b</sup> Mikhail Syroeshkin,<sup>a</sup> Anna Kozmenkova,<sup>a</sup> Andrey Lalov,<sup>a</sup> Michail Egorov<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, 47, Leninsky Prosp. Moscow 119991, Russia*

<sup>b</sup> *International Tomography Center, 3a Institutskaya Str., Novosibirsk 630090, Russia*

*Victor.Ovcharenko@tomo.nsc.ru*

Persistent organic radicals have attracted close attention from both theoretical and applied viewpoints. An intriguing idea of molecular magnetism is to create new types of magnetically active compounds saturated with organic components based on synthetic chemistry approaches. This would give magnets with properties typical of organic compounds: low density, elasticity, transparency over a broad range of the electromagnetic spectrum, high resistance to electric current, biocompatibility. We succeeded in synthesizing a whole family of paramagnetic organic salts  $M(L^{\cdot})(H_2O)_n$ , where  $L^{\cdot}$  is radical anion of difurazanopyrazine and M stands for Li, Na, K, Rb,  $NH_4$ . All solids were found to contain columns of planar  $L^{\cdot}$  radical anions, with alkali-metal cations and water molecules located between them. At temperatures below 4 K,  $Na(L^{\cdot})(H_2O)_3$  showed bulk magnetic ordering. This salt is actually the first example of organic magnet based on a high-nitrogen framework of pyrazine-fused furazans. A quantum-chemical study of  $M(L^{\cdot})(H_2O)_n$  revealed an unusual effect: the exchange coupling energy J between the neighboring radical anions proved highly sensitive to the motion of one  $L^{\cdot}$  relative to another. We explained the difference between the magnetic properties of  $Na(L^{\cdot})(H_2O)_3$  and those of other  $M(L^{\cdot})(H_2O)_n$  as well.

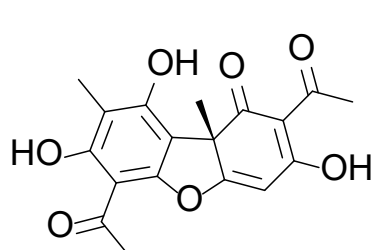
*The study was funded by the Minobrnauki (agreement with IOCh RAS 075-15-2020-803).*

# ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ГЕТЕРОЦИКЛЫ НА ОСНОВЕ РАСТИТЕЛЬНЫХ МЕТАБОЛИТОВ

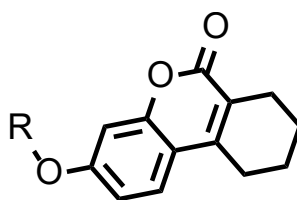
Салахутдинов Н.Ф.

*Новосибирский институт органической химии СО РАН  
 Новосибирск, проспекта академика Лаврейтева, 9  
 e-mail: anvar@nioch.nsc.ru*

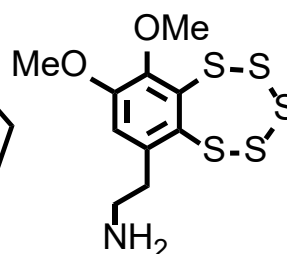
Растительные метаболиты являются чрезвычайно важным ресурсом при синтезе большого количества лекарственных препаратов и инновационных соединений-лидеров в наиболее востребованных и социально-значимых терапевтических областях. Нативная биологическая активность, предрасположенность молекул для химических трансформаций, низкая токсичность выдвигает этот класс органических соединений на передовые позиции стартовых молекул в медицинской химии. Очень большая часть полученных производных являются гетероциклическими соединениями.



Usnic acid



Coumarine



Varacin

В докладе рассмотрены методы синтеза и биологическая активность гетероциклических производных усниновой кислоты, ряда кумаринов и аналогов варацина. Полученные соединения являются эффективными ингибиторами ферментов репарации ДНК клетки, антидепрессантами и анальгетиками.

# ТРЕХКОМПОНЕНТНЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ПОЛИФТОРАЛКИЛСОДЕРЖАЩИХ КАРБО- И ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Салютин В.И., Горяева М.В., Куш С.О., Бургарт Я.В.

Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского  
Уральского отделения Российской Академии Наук,  
620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской 22 / Академическая 20  
e-mail: saloutin@ios.uran.ru

Мощным инструментом для создания новых соединений в современном органическом синтезе являются многокомпонентные реакции, которые позволяют путем простого одnoreакторного исполнения получать новые продукты из доступных исходных материалов.

В докладе обсуждаются синтетические возможности, открытой нами недавно<sup>1-4</sup>, трехкомпонентной реакции полифторалкил-3-оксоэфиров и метилкетонов (циклокетонов) с моно- и динуклеофилами (схема 1). Показано, что эти превращения являются универсальным подходом для формирования широкого спектра полифторалкилсодержащих карбо- и гетероциклов, структура которых определялась природой используемых метилкарбонильных и нуклеофильных компонент.

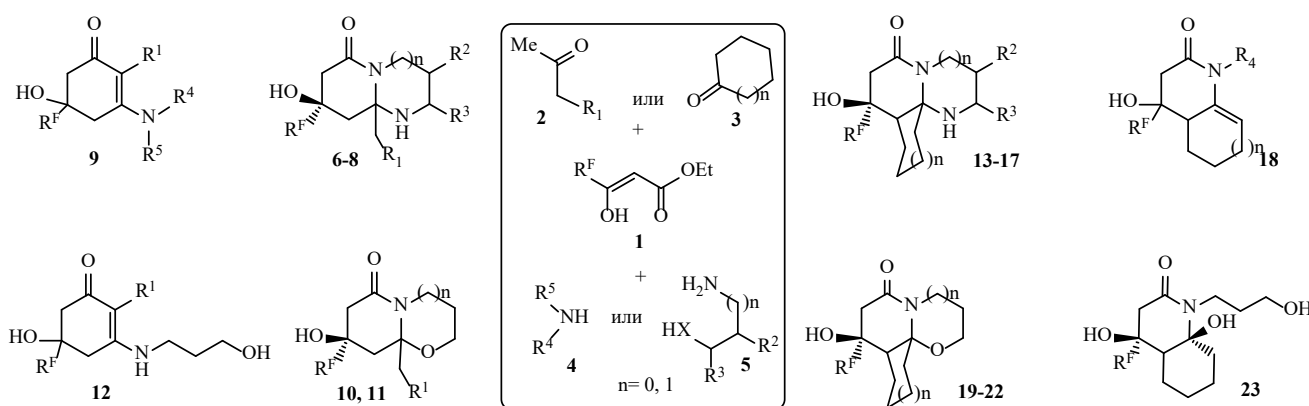


Схема 1. Трехкомпонентная реакция полифторалкил-3-оксоэфиров, кетонов и нуклеофилов

## Литература

- Goryaeva M.V., Burgart Ya.V., Ezhikova M.A., Kodess M.I., Slepukhin P.A., Saloutin V.I. *European Journal of Organic Chemistry*, 2015, 6306.
- Goryaeva M.V., Kushch S.O., Khudina O.G., Burgart Ya.V., Kudyakova Yu.S., Ezhikova M.A., Kodess M.I., Slepukhin P.A., Sadretdinova L.Sh., Evstigneeva N.P., Gerasimova N.A., Saloutin V.I. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 2019, 17, 4273.
- Saloutin V. I., Goryaeva M.V., Kushch S.O., Khudina O.G., Ezhikova M.A., Kodess M.I., Slepukhin P.A., Burgart Ya.V. *Pure and Applied Chemistry*, 2020, **92**, 1265.
- Goryaeva M.V., Kushch S.O., Khudina O.G., Burgart Ya.V., Ezhikova M.A., Kodess M.I., Slepukhin P.A., Volobueva A.S., Slita A.V., Esaulkova I.L., Misiurina M.A., Zarubaev V.V., Saloutin V.I. *Journal of Fluorine Chemistry*, 2021, **241**, 109686.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-13-00390.

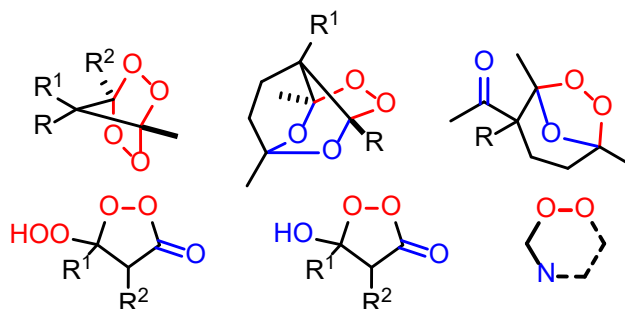
# СИНТЕЗ ЦИКЛИЧЕСКИХ ПЕРОКСИДОВ

Терентьев А.О.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: alterex@ioc.ac.ru*

Традиционно органические пероксиды широко применяются в полимерной химии в качестве инициаторов радикальной полимеризации и сшивающих агентов. Сравнительно новым и активно развивающимся направлением применения данного класса соединений является получение синтетических пероксидов с антипаразитарной, противоопухолевой, противовирусной и фунгицидной активностью.

Современные методы получения кислород-кислород содержащих циклических систем в большинстве случаев основаны на использовании синглетного кислорода, озона и пероксида водорода. Наиболее технологичным, удобным и безопасным является использование пероксида водорода. Однако, несмотря на вековую историю химии пероксидов, синтез кислород-кислород содержащих циклических систем с использованием пероксида водорода и карбонильных соединений остается малоизученным. В цикле работ предложены методы получения различных классов циклических органических пероксидов.



*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-43-04417.*



# НОВЫЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ И ЛЮМИНОФОРЫ: ОТ СИНТЕЗА МОЛЕКУЛ К МАТЕРИАЛАМ И УСТРОЙСТВАМ

[Пономаренко С.А.](#),<sup>а,б</sup> Агина Е.В.,<sup>а</sup> Борщев О.В.,<sup>а</sup> Лупоносов Ю.Н.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup> *Институт синтетических полимерных материалов  
им. Н.С. Ениколопова Российской Академии Наук, 117393, Москва, улица Профсоюзная 70,  
e-mail: [ponomarenko@ispm.ru](mailto:ponomarenko@ispm.ru)*

<sup>б</sup> *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Химический факультет, 119991, Москва, Воробьевы горы 1/3*

Современные методы органической химии позволяют получать широкий круг органических полупроводников и люминофоров для применения в различных электронных, оптоэлектронных и сенсорных устройствах<sup>1</sup>. При этом направленный синтез молекул с заданными свойствами открывает возможности создания на их основе новых устройств с уникальными характеристиками. В докладе будут рассмотрены подходы к синтезу ряда линейных, аннелированных и разветвленных органических полупроводников и люминофоров, а также их применение в органической электронике, оптоэлектронике и биоэлектронике.

Частичное или полное введение фторированных бензолных колец в тиофен-фениленовые олигомеры позволило тонко настроить положение их уровней НСМО, повысить квантовый выход люминесценции, сбалансировать электронный и дырочной транспорт в органических полевых транзисторах на их основе<sup>2</sup>. Впервые синтезированы алкилпроизводные тетраиноацена<sup>3</sup>, его 4алкилфениленовые и 5 алкилтиофеновые производные<sup>4</sup>, обладающие высокой подвижностью носителей заряда в монокристаллических пленках и электролюминесценцией. На основе дисилоксановых производных 2,7-диалкил-бензотиено-[3,2-б][1]-бензотиофена получены монослои, сверхчувствительные газовые сенсоры и прототип электронного носа<sup>5</sup>. Синтез новых донорно-акцепторных олигомеров заданного химического строения позволил улучшить свойства органических фотоэлементов на их основе<sup>6</sup>, изучить особенности сопряжения через трифениламинный разветвляющий центр<sup>7</sup> и приблизиться к созданию прототипа полноцветного протеза сетчатки человеческого глаза<sup>8</sup>.

## Литература

1. Шапошник П.А., и др., *Успехи Химии*, 2020, **89**, 1483
2. Sosorev A. Yu., at. al., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2020, **12**, 9507.
3. Skorotetcky M.S., at. al., *J. Mater. Chem. C*, 2021, **9**, 10216.
4. Borshchev O.V., at. al., *Dyes and Pigments*, 2021, **185**, 108911
5. Anisimov D.S., at. al., *Scientific Reports*, 2021, **11**, 10683.
6. Solodukhin A.N., at. al., *Energies*, 2021, **14**, 3596.
7. Luponosov Yu.N., at. al., *Dyes and Pigments*, 2020, **179**, 108397.
8. Skhunov M., at. al., *J. Mater. Chem. C*, 2021, **9**, 5858.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проекты 18-12-00499-П (кристаллические пленки органических полупроводников), 19-73-30028 (органическая биоэлектроника и сенсоры), 214300051 (органическая фотовольтаика).*

# АРОМАТИЧЕСКИЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ЛИГАНДЫ В ХИМИИ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ

Федин В.П., Павлов Д.И., Потапов А.С.,

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской Академии  
Наук, 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, 3  
e-mail: cluster@niic.nsc.ru*

В докладе рассмотрен синтез, строение и свойства металл-органических координационных полимеров (МОКП; metal-organic frameworks, MOF) на основе гетероциклических лигандов. Проведено сравнение МОКП, полученных на основе цинка(II) и терефталата или 1,4-тиофендикарбоксилата, а также изофталата или 1,4-тиофендикарбоксилата. Показано, что изменение карбоксильных лигандов позволяет перейти от серии микропористых МОКП к серии мезопористых каркасов. Введение легко поляризуемого атома серы в ароматический цикл существенно увеличивает способность пористого каркаса сорбировать углекислый газ.<sup>1-4</sup>

Производные 2,1,3-бензохалькогенадиазолов имеют ярко выраженные люминесцентные свойства, в связи с этим фрагменты этих гетероциклических соединений были включены в структуру линкеров для МОКП и синтезированы люминесцентные аналоги каркаса UiO-68 на основе циркония(IV) и 4,7-ди(4-карбоксифенил)-2,1,3-бензохалькогенадиазолов. Было установлено, что при переходе от кислорода к сере и селену в составе лиганда происходит смещение полос возбуждения и эмиссии в длинноволновую область. При этом квантовый выход люминесценции снижается в этом ряду и имеет максимальное значение в 42 % для производного 2,1,3-бензоксадиазола.

Было установлено, что после обработки ультразвуком и отстаивания МОКП образуют стабильные в течение нескольких суток коллоидные суспензии. Люминесцентный отклик каркаса был исследован на примере диэтиламина в качестве аналита, при этом наблюдался эффект значительного увеличения интенсивности («разгорания») люминесценции. Интенсивность люминесценции зависела от концентрации диэтиламина, что может быть использовано для обнаружения данного соединения в низких концентрациях в водных растворах.

## Литература

- [1] A.A. Lysova et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, *141*, 17260.
- [2] A.A. Lysova et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, *59*, 20561.
- [3] V.A. Bolotov et al., *Inorg. Chem.*, **2018**, *57*, 5074.
- [4] M.O. Barsukova et al., *Inorg. Chem.*, **2021**, *60*, 2996.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 19-73-20087) и РФФИ (проект 20-33-70026).*

# 1,3-ДИАЗА-2-МЕТАЛЛОЛЫ

Федюшкин И.Л.

*Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской Академии Наук,  
603137, Нижний Новгород, Тropicина 49,  
e-mail: igorfed@iomc.ras.ru*

Включение атома металла в состав органического гетероцикла приводит к существенному изменению его электронной структуры и, как следствие, его спектральных свойств и реакционной способности. Так, реакционная способность сопряженных 5- и 6-ти членных металлоциклов, содержащих непереходные металлы, например, металл- $\beta$ -дикетиминаты (Рис. 1, структура I) или 1,3-диаза-2-металлолы (Рис. 1, структура II) близка таковой фрустрированных ионных пар (FLP).

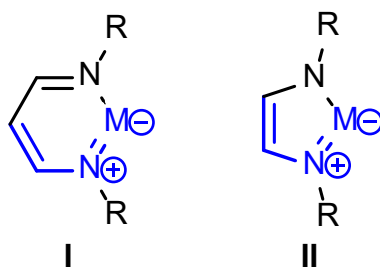


Рисунок 1. Сопряженные 5- и 6-ти шестичленные металлоциклы.

Как и в FLP атомы металла в структурах I и II являются реакционными центрами. Металлоциклы с «диеновым фрагментом»  $C=C-X=M$  ( $X = N$  или  $O$ ) вступают в реакции 4+2 циклоприсоединения алкенов, алкинов, алленов, гетероаренов, енонов и т.д.<sup>1-3</sup>. Эти реакции легко протекают благодаря орбитальным и зарядовым эффектам: смешение орбиталей металла и органического фрагмента, а также перенос электронной плотности от атома металла к гетероатомам приводит к возрастанию энергии граничных орбиталей металлогетероцикла. Это, в свою очередь, приводит к выигрышу в энергии при взаимодействии HСМО субстрата с подходящими по симметрии орбиталями гетероцикла. Интересно, что металлоциклы I и II могут активировать также  $\sigma$ -связи, например, в алкилгалогенидах<sup>3</sup>.

## Литература

1. M.D. Anker, M. Arrowsmith, P. Bellham, M.S. Hill, G. Kociok-Köhn, D.J. Liptrot, M.F. Mahon, C. Weetman, Chem. Sci. 2014, 5, 2826.
2. T.E. Stennett, J. Pahl, H.S. Zijlstra, F.W. Seidel, S. Harder, Organometallics 2016, 35, 207.
3. I.L. Fedushkin, V.M. Makarov, E.C.E. Rosenthal, G.K. Fukin, Eur. J. Inorg. Chem. 2006, 827.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-53-53012.*



# ПРИГЛАШЕННЫЕ ДОКЛАДЫ

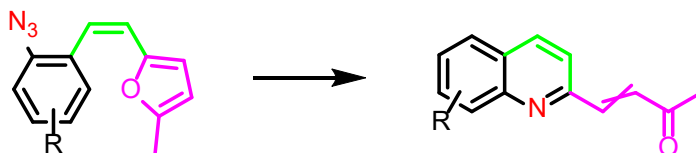
# РАСКРЫТИЕ ФУРАНОВОГО ЦИКЛА АЗИДНОЙ ГРУППОЙ: СИНТЕЗ ХИНОЛИНОВ\*

[Абаев В.Т.](#),<sup>1,2</sup> Чаликиди П.Н.,<sup>1</sup> Магкоев Т.Т.<sup>1</sup>

*1 Северо-Осетинский университет им. Коста Левановича Хетагурова,  
ул. Ватутина 43-46, Владикавказ, 362025, Российская Федерация*

*2 Северо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина 1а, Ставрополь  
355009, Российская Федерация  
hampazero@mail.ru*

Фурановый цикл претерпевает внутримолекулярное окислительное раскрытие цикла под действием нитрена генерируемого термолизом азидной функции, что было использовано в синтезе халконов индольного ряда.<sup>1</sup> Нами найдено, что удлинение линкера между 2-азидофенильным фрагментом и фураном может протекать с образованием пиридинового цикла. Так 2-азидостирилфураны, являющиеся типичными субстратами реакции Хеметсбергера, при термолизе вместо С-Н аминирования претерпевают раскрытие фуранового цикла с образованием хинолинов.



В докладе будут рассмотрены основные закономерности протекания этого процесса и сфера его применимости.

## Литература

1. V. T. Abaev, A. T. Plieva, P. N. Chalikidi, M. G. Uchuskin, I. V. Trushkov, A. V. Butin *Org. Lett.* **2014**, 16, 4150–4153

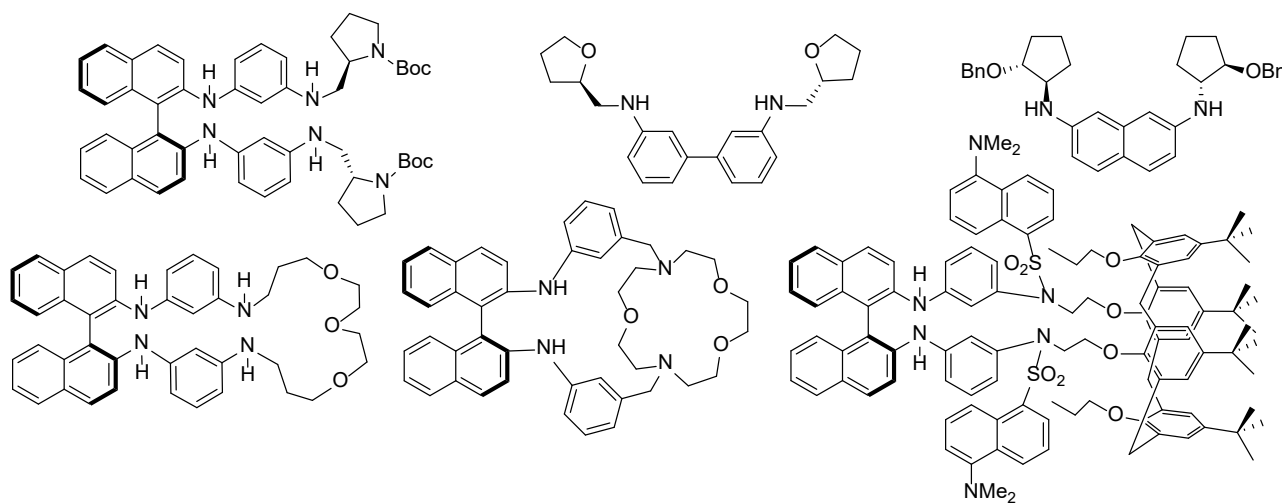
*Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (грант № 19-03-01027) и министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 0795-2020-031).*

# СИНТЕЗ ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНЫХ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ ДЕТЕКТОРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАЛЛАДИЙ-КАТАЛИЗИРУЕМОГО АМИНИРОВАНИЯ

**Аверин А.Д., Малышева А.С., Григорова О.К., Белецкая И.П.**

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, 119991, Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр.3,  
*e-mail: alexaveron@yandex.ru*

Использование спектроскопии флуоресценции для получения аналитического сигнала является в настоящее время приоритетным направлением в создании разнообразных молекулярных хемосенсоров. Наш подход к получению энантиоселективных флуоресцентных детекторов заключается в широком варьировании структур соединений, содержащих в своем составе флуорофорные и хиральные группы, и использование Pd(0)-катализируемого аминирования (гетеро)арилгалогенидов для формирования связи между аналитической и рецепторной частями молекул.<sup>1</sup> Таким образом, синтезированы семейства соединений, продемонстрировавших свою возможность выступать в качестве указанных детекторов, на основе 3,3'-диаминобифенила, 2,7-диаминонафталина и 2,2'-диамино-1,1'-бинафтила (БИНАМа), получены макроциклические и макробициклические производные БИНАМа, содержащие в своем составе структурные фрагменты оксадиаминов, азакраун-эфиров, диаминокаликс[4]аренов. Изучение возможностей полученных соединений выступать в качестве энантиоселективных флуоресцентных детекторов осуществляется с использованием набора индивидуальных энантиомеров семи модельных аминокислот.



## Литература

1. Averin A.D., Grigорова O.K., Malysheva A.S., Shaferov A.V., Beletskaya I.P. *Pure and Appl. Chem.*, **2020**, 92, 1367.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-03-00796.*

# ДИЗАЙН НОВЫХ ХИМИЧЕСКИХ ТРАНСФОРМАЦИЙ НА ОСНОВЕ НИТРОАЛКЕНОВ

[Аксенов А.В.](#),<sup>a</sup> Аксенов Д.А.,<sup>a</sup> Аксенов Н.А.,<sup>a</sup> Аксенова И.В.,<sup>a</sup> Рубин М.А.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Северо-Кавказский федеральный университет, 355017, Россия, г. Ставрополь, ул. Пушкина, д. 1  
e-mail: aaksenov@ncfu.ru

<sup>b</sup>University of Kansas, 1567 Irving Hill Rd., Lawrence, KS 66045-7582, USA.

Создание новых классов лекарственных препаратов является актуальной задачей, в решение которой вовлечено значительное число научных коллективов. Особое место занимает поиск новых молекулярных каркасов для поиска противоопухолевых препаратов и более эффективных путей синтеза уже известных структур с противораковой активностью.

В последнее время среди новых синтетических методов большое значение приобретают: metalfree C-H -функционализация, трансаннелирование, ring economy - процессы. Именно развитию таких методологий в сочетании с методологией, включающей дизайн «умных реакционных сред», которая успешно развивается в нашей лаборатории, посвящен этот доклад. Он включает разработку методов синтеза на основе реакций индолов с неопределенными нитросоединениями и нитроалканами. Основываясь на этой методологии, удалось получить большое количество соединений с высокой противораковой активностью, причем ряд веществ проявляют редкое свойство – обратную дифференциацию.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ грант 21-73-20051.*



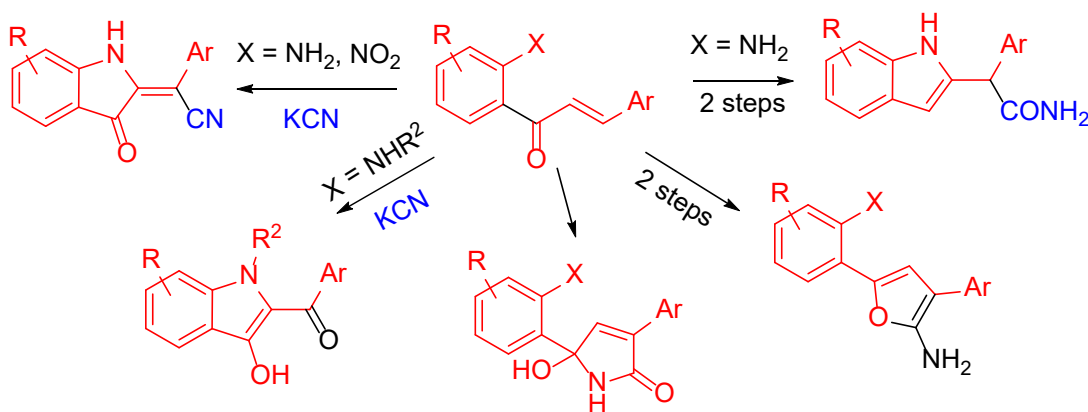
## НЕОБЫЧНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ХАЛКОНОВ В ПРИСУТСТВИИ ЦИАНИД-ИОНА

**Аксенов Н.А.,<sup>a</sup> Аксенов А.В.,<sup>a</sup> Аксенов Д.А.,<sup>a</sup> Притыко Л.А.,<sup>a</sup> Аксенова Д.С.<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Северо-Кавказский федеральный университет, 355017, г. Ставрополь, ул. Пушкина 1,  
e-mail: [naksenov@ncfu.ru](mailto:naksenov@ncfu.ru)

Одной из ключевых задач и, в тоже время, важных инструментов органической химии, является постоянный поиск новых, эффективных синтетических методов. При этом, создаваемые вновь синтетические методы должны отвечать требованию универсальности и эффективности. Это обуславливает большой интерес именно к превращениям малых молекул, часто встречающихся в различных структурах виде легко получаемых субъединиц.

Такой субъединицей, без сомнения, можно считать проп-2-ен-1-оновый фрагмент – основу для многих мощных реакций. В поисках новых универсальных методов мы обратили внимание на химию халконов. Несмотря на общую высокую изученность направления, наши предшественники почти полностью обошли вниманием обширный пласт превращений, основанный на взаимодействии халконов с цианистым калием. Высокая гибкость возможных структур исходных соединений позволила нам осуществить ряд необычных каскадных превращений, включающих такие стадии как, например, нуклеофильную атаку по нитрогруппе<sup>1</sup> или протекающих с обращением полярности карбонильной группы<sup>2</sup>.



### Литература

1. Aksenov N.A., Aksenov D.A., Arutiunov N.A., Aksенова D.S., Aksенов A.V., Rubin M. *RSC Adv.*, 2020, **10**, 18440.
2. Aksenov N.A., Aksenov D.A., Skomorokhov A.A., Prityko L.A., Aksенов A.V., Griaznov G.D., Rubin M. *J. Org. Chem.*, 2020, **85**, 12128.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-10029, <https://rscf.ru/project/21-73-10029/>.

# ИЗ ИСТОРИИ ОДНОЙ РЕЦИКЛИЗАЦИИ

[Бабаев Е.В.](#)

*МГУ имени М.В.Ломоносова*

В 1976 г. С.П. Громов, Р.С. Сагитуллин и А.Н. Кост зарегистрировали открытие 205 “Явление изомеризационной рециклизации азотистых гетероароматических соединений” известное в наши дни под разными терминами (енаминовая перегруппировка, изомеризационная рециклизация пиридинового ядра или реакция Коста-Сагитуллина). Далее (начиная с 1976 г.) последовали открытые публикации по реакциям превращения пиридинов в анилины и индолизинов в индолы. В итоге аспирант Громов защитил кандидатскую (1978), а его руководитель Сагитуллин – докторскую (1979) диссертацию. Открытию предшествовала письмо в ХГС Т.В. Мальниковой (в соавт. с Костом и Сагитуллиным) 1974 г. по перегруппировке примидоиндолов в альфа-карболины. Исследования расширились: в 1978 г. защитил кандидатскую диссертацию Г.Г. Данагулян (превращения пиримидинов, успешно продолжающиеся в наши дни) и в 1981 г. В.И. Теренин (превращения изохинолинов), а на кафедре общей химии в 1981 г. – В.А. Тафеенко (рентгеноструктурный анализ енаминовой перегруппировки). В 1979 г. Кост умер, и с 1980 г. его лабораторию возглавил Ю.Г. Бундель, интересы которого во многом включали физическую органическую химию. В 1981 г. Сагитуллин уехал в университет г. Омска, где проводил дальнейшие исследования енаминовой перегруппировки совместно с Г.П. Шкиль (Сагитуллиной) и сотрудниками вплоть до своей кончины в 2010 г. В лаборатории Биологически активных азотистых оснований оставался С.П. Громов, и по окончании университета в 1982 г. я влился в состав его группы. В 1987 г. я защитил диссертацию по енаминовой перегруппировке (галоформной рециклизации индолизинов в индолкарбоновые кислоты) и в дальнейшем переключился на прогноз и экспериментальный поиск новых трансформаций азолов. В лаборатории существовала еще одна группа (В.И. Теренин), занимавшаяся енаминовой перегруппировкой (в основном, конденсированных пиразинов), и успешно защищались аспиранты Румянцев (1989), Кабанова (1993), Иванов (2006). Громов продолжал исследования по трансформации пиридинов и (в период руководства индийской аспиранткой Бхаумик) обнаружил в 1987 г. еще одно весьма необычное превращение – образование индолов при реакции кетиминов с нитропиридиниевыми солями. Не доведя исследования до конца, Громов покинул МГУ, и эта реакция досталась М.А. Юровской. В ее группе был проведен ЯМР анализ продуктов (В.А. Чертков) и молекулярный дизайн с вариацией структуры радикалов, в результате чего защитили кандидатскую диссертацию А.З. Афанасьев (1988) и докторскую М.А. Юровская (1990).

# ТРИТИЛЬНЫЕ РАДИКАЛЫ И БИРАДИКАЛЫ: СИНТЕЗ, СВОЙСТВА, ПРИМЕНЕНИЕ

Багрянская Е.Г., Тормышев В.М., Крумкачева О.А.

Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова  
Сибирского отделения Российской академии наук,  
Российская Федерация, 630090 Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, 9.  
E-mail: [egbagryanskaya@nioch.nsc.ru](mailto:egbagryanskaya@nioch.nsc.ru)

В докладе рассмотрены методы синтеза радикалов и бирадикалов трис(тетрагидраарил)метильного (ТАМ) ряда [1-7]. Показано, что уникальные свойства этих радикалов позволяют решать широкий круг физико-химических и биофизических задач, благодаря новым синтетическим подходам, позволяющим получать радикалы с широким разнообразием функциональных свойств. На основе реализованных в последние годы удобных в исполнении подходов к препаративному синтезу базовых форм ТАМ, интенсивное развитие получило направление органического синтеза, ориентированное на получение модифицированных форм ТАМ, отличающихся широким многообразием введенных функциональных групп и, соответственно, многообразием свойств. Получены высокочувствительные спиновые зонды, используемые в биомедицинской практике [3,6]. При этом впервые получены функциональные производные высокополярного тритила ОХ063, предназначенные для сайт-направленного спин-мечения пептидов по цистеиновым позициям [7]. На примере человеческого сывороточного альбумина показано, что даже в случае высоколабильных пептидов, может обеспечиваться спин-мечение с количественными эффективностью и селективностью. Предложены и реализованы подходы к получению представительного набора спиновых меток с остовом ТАМ. С их использованием проведено эффективное спинмечение макромолекул биологической природы: пептидов, мембранных белков, олигонуклеотидных дуплексов и супрамолекулярных нуклеопротеидных комплексов. В ходе этих исследований впервые получены функциональные производные высокополярного тритила ОХ063, обеспечивающие высокую селективность ковалентного присоединения к пептидам по фиксированным цистеиновым позициям. Можно ожидать, что новые реагенты найдут новые приложения в практике биомедицинских исследований [2-7].

## Литература

- [1] O. Krumkacheva, E. Bagryanskaya, Trityl radicals as spin labels From the book: Electron Paramagnetic Resonance: Volume 25, 2016, 25, 35-60. ISSN:978-1-78262-857-6
- [2] Andrey A. Kuzhelev, et al., *J. Phys. Chem. B* **2018**, *122*, 8624–8630
- [3] B. Joseph, S. Ketter, A. Gopinath, O. Rogozhnikova, D. Trukhin, V.M. Tormyshev, E.G. Bagryanskaya, *Chemistry - A European Journal*, **2021**, *27*, 2299-2304
- [4] S. Bothe, et al. *J. Phys. Chem. C.*, 2018, **122**, 11422.
- [5] K. Sato, et al. , *The Journal of Physical Chemistry A* **2019** *123* (34), 7507-7517
- [6] M. Bretschneider, et al, *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, *11*, 6286–6290
- [7] V. Tormyshev, et al. *Chem.-A Europ. Journ.* **2020**, *26*, 2705-2712

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского Научного Фонда (грант № 21-14-00219).

# РЕАКЦИИ 2-ЦИАНОАЦЕТАМИДИНОВ С СУЛЬФОНИЛАЗИДАМИ, АРИЛ AND ГЕТЕРОАРИЛАЗИДАМИ

[Bakulev V.A.](#), Silaichev P.S. and Beryozkina T.V.

*Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia*  
*v.a.bakulev@urfu.ru*

В начале этого тысячелетия 1,2,3-триазолы стали очень модными и доступными соединениями благодаря замечательному открытию Мелдала и Шарплесса медью катализируемой реакции циклоприсоединения ацетиленов к азидам.[1] В свою очередь обнаруженная реакция предоставила доступ к большому количеству разнообразных производных 1,2,3-триазола и облегчила выявлению среди них высокоактивных биологически активных веществ [2], разработку уникальных билдинг-блоков и применению их в органическом синтезе [2], использованию реакций триазолов в биологической химии [3] и получению новых материалов. [4,5]

Однако, эта реакция не подходит для синтеза 1,2,3-триазолов, содержащих в молекуле как амино, так и амидиновую группу, представляющих большой интерес медицинской химии.[6].

Поскольку несколько 5-амино-1,2,3-триазолов были синтезированы реакцией 2-этоксикарбонилацетамидинов [10] и малондинитрила с бензолсульфониламидином [7,8]] мы обратили свое внимание на реакции 2-цианоацетамидинов с сульфонилазидом как путь к образованию 5-амино-1,2,3-триазол-4-карбимидаминов.

Необходимо отметить, что в отличие от хорошо изученных реакций 2-цианоацетамидинов с азидами, химия их аза аналогов, 2-цианоацетамидинов бедно представлена в научной литературе [10-12] и их реакции с азидами представлены единичной статьей [12]. Представленный в докладе материал демонстрирует реализацию трех направлений 2-цианоацетамидинов в реакции с азидами с образованием различным образом замещенных 1,2,3-триазолов.

Влияние структуры исходных реагентов, растворителя и температуры будут также представлены в докладе.

## References

- ([1] (a) Tornøe, C. W.; Christensen, C.; Meldal, M. *J. Org. Chem.* **2002**, 67, 3057–3064. (b) Rostovtsev, V. V.; Green, L. G.; Fokin, V. V.; Sharpless, K. B. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, 41, 2596–2599.
- [2] (a) Bozorov, K.; Zhao, J.; Aisa, H. A. *Bioorg. Med. Chem.* **2019**, 27, 3511–3531.
- [3] Davies, H. M. L.; Alford, J. S. *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 34, 5151–5162.
- [4] Zheng, T.; Rouhanifard, S. H.; Jalloh, A. S.; Wu, P. *Top Heterocycl. Chem.* **2012**, 28, 163–184.
- [5] (Li, Y.-C.; Qi, C.; Li, S.-H.; Zhang, H.-J.; Sun, C.-H.; Yu, Y.-Z.; Pang, S.-P. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, 132, 12172–12173.
- [6] Bakulev, V. A.; Beryozkina, T.; Thomas, J.; Dehaen, W. *Eur. J. Org. Chem.* **2018**, 262–294.
- [7] Dankova, E. F.; Bakulev, V. A.; Krutko, D. P. *Khim. Geterotsikl. Soedin.* **1991**, 775–782
- [8] Raushel, J.; Pitram, S. M.; Fokin, V. V. *Org. Lett.* **2008**, 10, 3385–3388.
- [10] Filimonov, V. O.; Dianova, L. N.; Galata, K. A.; Beryozkina, T. V.; Novikov, M. S.; Berseneva, V. S.; Eltsov, O. S.; Lebedev, A. T.; Slepukhin, P. A.; Bakulev, V. A. *J. Org. Chem.* **2017**, 82, 4056–4071.
- [11] Filimonov, V. O.; Dianova, L. N.; Beryozkina, T. V.; Mazur, D.; Beliaev, N. A.; Volkova, N. N.; Ilkin, V. G.; Dehaen, W.; Lebedev, A. T.; Bakulev, V. A. *J. Org. Chem.* **2019**, 84, 13430–13446.
- [12] (Shafran, Y. M.; Silaichev, P. S.; Bakulev, V. A. *Chem. Heterocycl. Compds.* **2019**, 12, 0000-0000.

*Acknowledgements. This work was supported by the Russian Science Foundation (project No 18-13-00161-II).*

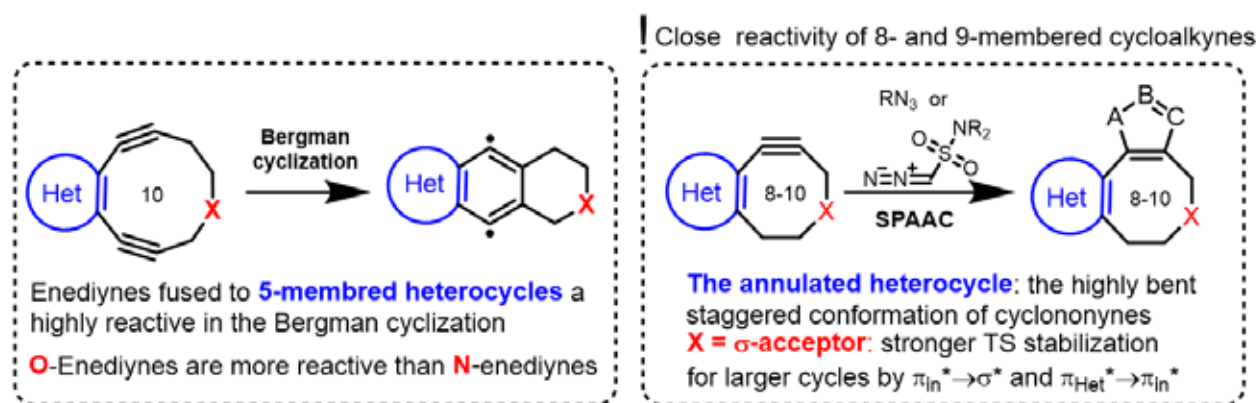
# ГЕТЕРОЦИКЛОАЛКИНЫ И ДИИНЫ: ДИЗАЙН, СИНТЕЗ, ПРИМЕНЕНИЕ В БИМЕДИЦИНЕ

**Балова И.А., Данилкина Н.А.**

*Институт Химии, Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7/9,  
e-mail: i.balova@spbu.ru*

Напряжённые циклодиены и циклоалкины, имеющие гетероатомы в цикле и одновременно конденсированные с гетероциклическим ядром, представляют собой уникальные объекты с возможностью тюнинга их свойств путем варьирования природы гетероцикла и гетероатома.

Диеновые системы, конденсированные с гетероциклами и содержащие гетероатом в 10-членном фрагменте, представляют собой новую группу синтетических аналогов природных эндиновых антибиотиков. Полученные нами данные подтверждают, что гетероциклический фрагмент является тем ключевым структурным звеном, который позволяет регулировать реакционную способность всей эндиновой молекулы в циклизации Бергмана, лежащей в основе механизма действия эндиновых антибиотиков. Включение гетероциклов и гетероатомов в состав молекулы эндиина также позволяет использовать их как сайты для модификации эндиновой молекулы и увеличения ее аффинности к ДНК.



Оба структурных мотива - гетероцикл и гетероатом также могут служить для модуляции баланса стабильности / реакционной способности напряженных молекул циклоалкинов, что было использовано при дизайне новых реагентов SPAAC.

## Литература

1. Lyapunova, A.G., Danilkina, N. A., Rumyantsev A. M., Khlebnikov A. F., Chislov M.V., Starova G.L., Sambuk E.V., Govdi A.I., Bräse S., Balova I. A. *J. Org. Chem.* 2018, **83**, 2788–2801.
2. Govdi A.I., Danilkina N.A., Ponomarev A.V., Balova I. A. *J. Org. Chem.* 2019, **84**, 1925–1940.
3. Danilkina N.A., D'yachenko A., Govdi A.I., Khlebnikov A.F., Komyakov I., Bräse S., Balova, I. A. *J. Org. Chem.* 2020, **85**, 9001–9014.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (№ 21-13-00218).*

# РЕАКЦИИ 2-ХАЛЬКОГЕН-ИМИДАЗОЛ-4-ОНОВ С НИТРИЛИМИНАМИ В СИНТЕЗЕ ПОЛИСПИРОСОЧЛЕНЕННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

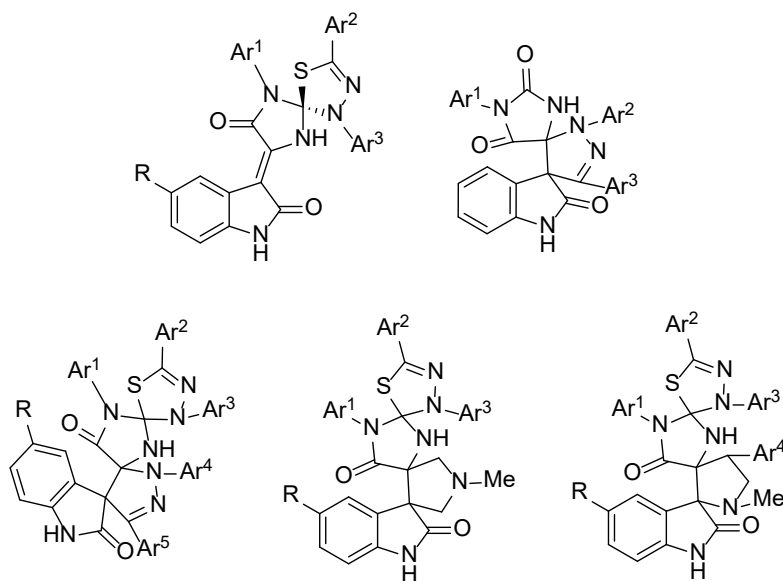
[Белоглазкина Е.К.](#), Кукушкин М.Е., Филькина М.Е.

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы 1-3,  
e-mail: [bel@org.chem.msu.ru](mailto:bel@org.chem.msu.ru)

Спиросочлененные гетероциклические соединения перспективны с точки зрения их биомедицинского применения, позволяя жестко фиксировать конформацию молекул и расположение экзоциклических заместителей друг относительно друга. Ранее в лаборатории БАОС Химического факультета МГУ были синтезированы спироциклические соединения тио-гидантоинового и гидантоинового ряда реакциями 5-метилзамещенных имидазолонов с азометинидами. Было продемонстрировано, что соединения данного типа демонстрируют высокую противоопухолевую активность<sup>1</sup>.

В последнее время нами показана возможность использования реакций 1,3-дипольного циклоприсоединения как одного из эффективных методов сборки спиросочлененных гетероциклов, и гидразонилхлоридов в качестве источника реакционных нитрилиминов, для получения молекул, содержащих в своей структуре пиразолиновые циклы, спиросочлененные с имидазолоновыми и индолиновыми.

В результате разработаны методы синтеза моно-, ди- и три-спиропроизводных показанных на схеме ниже структурных типов.



## Литература

1. Kukushkin M.E., et al. *Phosphorus, Sulfur, Silicon*, 2020, **195**, 544
2. Ivanenkov Y.A., et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 2015, **25**, 404

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-13-00023.



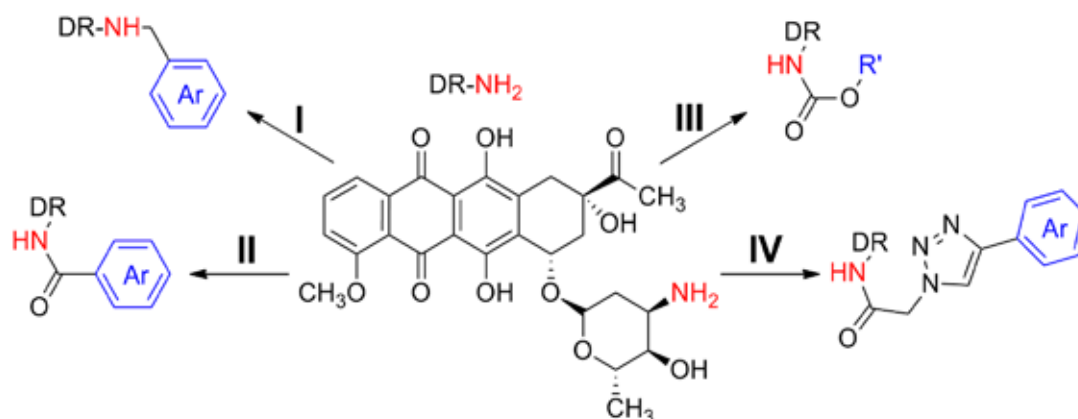
# СТРУКТУРНАЯ МОДИФИКАЦИЯ АНТРАЦИКЛИНОВОГО АНТИБИОТИКА ДАУНОРУБИЦИНА

**Брель В.К.,** Аргюшин О.И., Моисеева А.А.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук,  
119991, Москва, ул., Вавилова 28,  
e-mail: v\_brel@mail.ru*

Даунорубицин и другие антрациклиновые антибиотики, широко используются в терапии опухолевых заболеваний различной этиологии. Однако большинство применяемых антрациклинов обнаруживают ряд серьезных побочных эффектов, что существенно ограничивает их использование. Одним из подходов к созданию безопасных лекарственных форм на основе антрациклинов, является их структурная модификация.

Нами впервые была синтезирована серия производных известного противоракового препарата даунорубицина, имеющих в своём составе органические и элементоорганические функциональные группы, конъюгированные с NH<sub>2</sub>-группой гликозидной части молекулы даунорубицина посредством спейсеров различной природы (аминными, амидными, карбаматными и триазольными).



При скрининге антипролиферативных свойств полученных таким образом конъюгатов и определении острой токсичности этих соединений, были выявлены препараты-лидеры, по своей эффективности превосходящие исходный антрациклин.

# ОКТАЭДРИЧЕСКИЕ МЕТАЛЛОКЛАСТЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ С ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИМИ АПИКАЛЬНЫМИ ЛИГАНДАМИ

[Брылев К.А.](#)

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения  
Российской академии наук, 630090, Новосибирск,  
Проспект Академика Лаврентьева 3,  
e-mail: brylev@niic.nsc.ru*

Октаэдрические металлокластерные комплексы, описываемые общими формулами  $[\{Mo_6X_8\}L_6]^n$  и  $[\{Re_6Q_8\}L_6]^m$  ( $X = Cl, Br$  или  $I$ ;  $Q = S$  или  $Se$ ;  $L =$  апикальные неорганические или органические лиганды), гармонично сочетают перспективные для различных приложений химические и физические свойства<sup>1-3</sup>. В частности, такие комплексы демонстрируют высокую химическую и фотостабильность кластерных ядер  $\{Mo_6X_8\}^{4+}$  и  $\{Re_6Q_8\}^{2+}$ , которые ответственны за триплетную возбужденное состояние люминесценции. Соединения на основе данных кластеров характеризуются широкими спектрами люминесценции, простирающимися от ~550 до более 950 нм, впечатляющими для неорганических материалов квантовыми выходами эмиссии и являются эффективными фотосенсибилизаторами генерации синглетного кислорода. Различные исследовательские группы подтвердили биосовместимость и низкую токсичность различных октаэдрических металлокластерных комплексов. Все вместе эти свойства делают такие комплексы привлекательными объектами для создания люминесцентных материалов и для биомедицинских приложений, например, в качестве фотосенсибилизаторов для фотодинамической терапии и люминесцентных маркеров для биовизуализации.

Некоторые подробности о синтезе, строении, люминесцентных и биологических свойствах различных октаэдрических кластерных комплексов молибдена и рения с гетероциклическими апикальными лигандами будут представлены в докладе.

## Литература

1. Cordier S., Grasset F., Molard Y., Amela-Cortes M., Boukherroub R., Ravaine S., Mortier M., Ohashi N., Saito N., Haneda H. *J. Inorg. Organomet. Polym. Mater.*, **2015**, 25, 189.
2. Cordier S., Molard Y., Brylev K.A., Mironov Y.V., Grasset F., Fabre B., Naumov N.G., Mikhaylov M.A., Sokolov M.N. *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2019**, 4181.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-20196.*

# ДИЗАЙН НОВЫХ КАРКАСНЫХ ФОСФОНАТОВ – ПЕРСПЕКТИВНОЙ ПЛАТФОРМЫ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЛИНЕЙНЫХ И МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

**Бурилов А.Р.,<sup>а</sup> Садыкова Ю.М.,<sup>а</sup> Залалтдинова А.В.,<sup>б</sup> Смаилов А.К.,<sup>б</sup> Пудовик М.А.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup>*ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН,  
420088, Казань, ул. Ак. Арбузова, 8  
e-mail: burilov\_2004@mail.ru*

<sup>б</sup>*Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
420015, Казань, ул. К. Маркса, 68*

Тенденция последних лет показывает, что одним из наиболее приоритетных направлений в развитии химии элементоорганических и органических соединений является дизайн новых типов каркасных структур. Наиболее перспективными для конструирования такого типа соединений являются производные четырех координированного атома фосфора, способные формировать строго ориентированные в пространстве каркасные структуры. В литературе имеются данные по синтезу каркасных соединений, циклический остов которых формируется из различных типов эндоциклических связей P–Э (Э – атомы кислорода, азота, углерода). Практический интерес к подобным жестко структурированным структурам определяется возможностью использовать их в качестве лигандов в металлокомплексном катализе<sup>1</sup>, органокатализаторов, а также лекарственных средств широкого спектра действия. В настоящем докладе приведены обобщенные результаты наших исследований по конструированию неизвестных ранее симметричных, региоизомерных каркасных фосфонатов, полученных в результате открытой нами новой каскадной реакции 2-этоксивинилдихлорфосфоната с различными фенолами; продемонстрирован новый, оригинальный подход к синтезу неизвестного ранее класса каркасных фосфонатов несимметричного строения на основе производных фосфоринина. Обсуждается создание новых типов рецепторных (функционализированных) систем, в том числе пинцера типа, на платформах симметричных и несимметричных каркасных фосфонатов.

## Литература

I. Hariri M., Darvish F., Mengue Me Ndong K.-P., Sechet N., Chacktas G., Boosaliki H., Minh Loan Tran Do, Mwande-Maguene G., Lebib J., Burilov A.R., Ayad T., Virieux D., Pirat J.-L. *Journal of Organic Chemistry*, **2021**, 86 (11), 7813.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 20-03-00118*

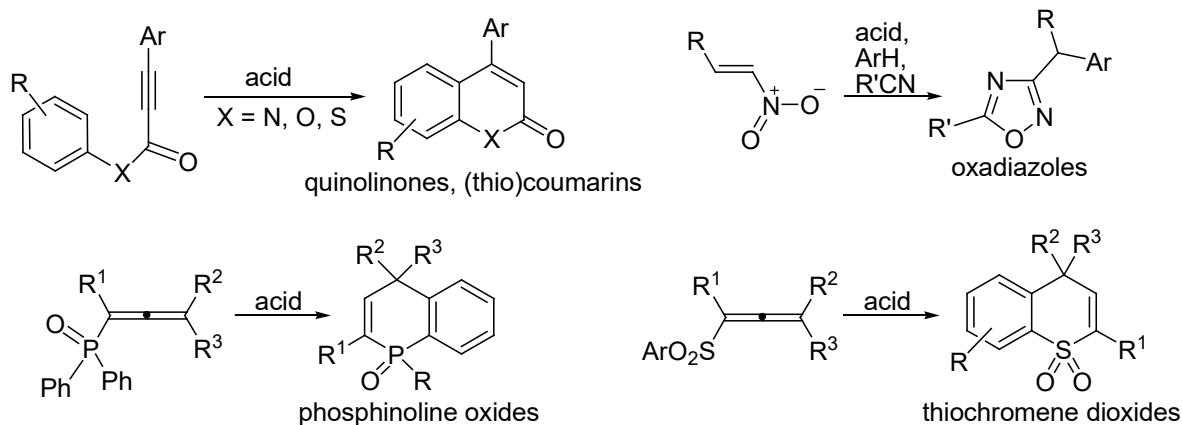
# СИНТЕЗ И СТРУКТУРНАЯ МОДИФИКАЦИЯ ГЕТЕРОЦИКЛОВ В УСЛОВИЯХ СУПЕРЭЛЕКТРОФИЛЬНОЙ АКТИВАЦИИ

**Васильев А.В.**<sup>a,b</sup>

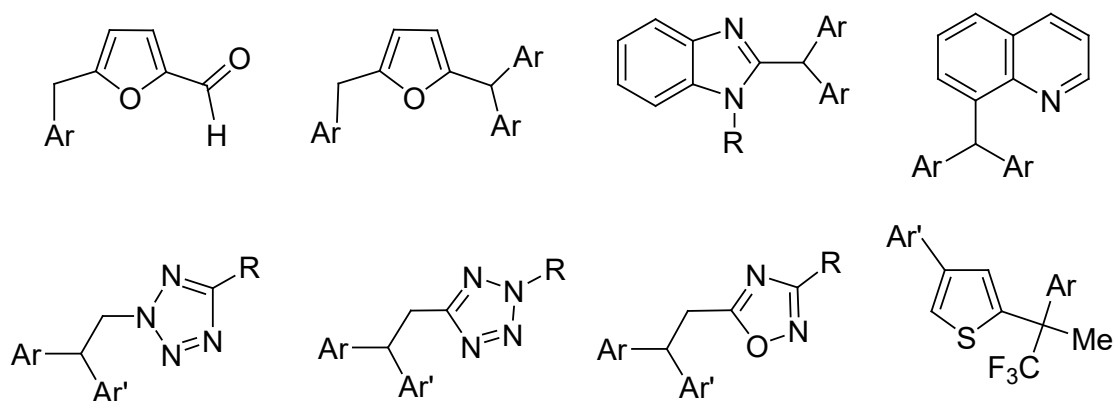
<sup>a</sup>Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет,  
194021, Санкт-Петербург, Институтский пер. 5,

<sup>b</sup>Санкт-Петербургский государственный университет,  
194021, Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9,  
e-mail: aleksvasil@mail.ru

Суперэлектрофильная активация органических соединений под действием сильных кислот Бренстеда ( $\text{CF}_3\text{SO}_3\text{H}$ ,  $\text{FSO}_3\text{H}$ ,  $\text{HF}$ ) и Льюиса ( $\text{AlCl}_3$ ,  $\text{AlBr}_3$ ,  $\text{SbF}_5$ ) или кислотных цеолитов (CBV-720, CBV-500) является эффективным методом синтеза разнообразных гетероциклических систем.



Метод электрофильной активации позволяет осуществлять структурные модификации боковых цепей и гетероциклических ядер фуранов, хинолинов, тетразолов, бензимидазолов, тиофенов и других гетероциклов.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-13-00006.

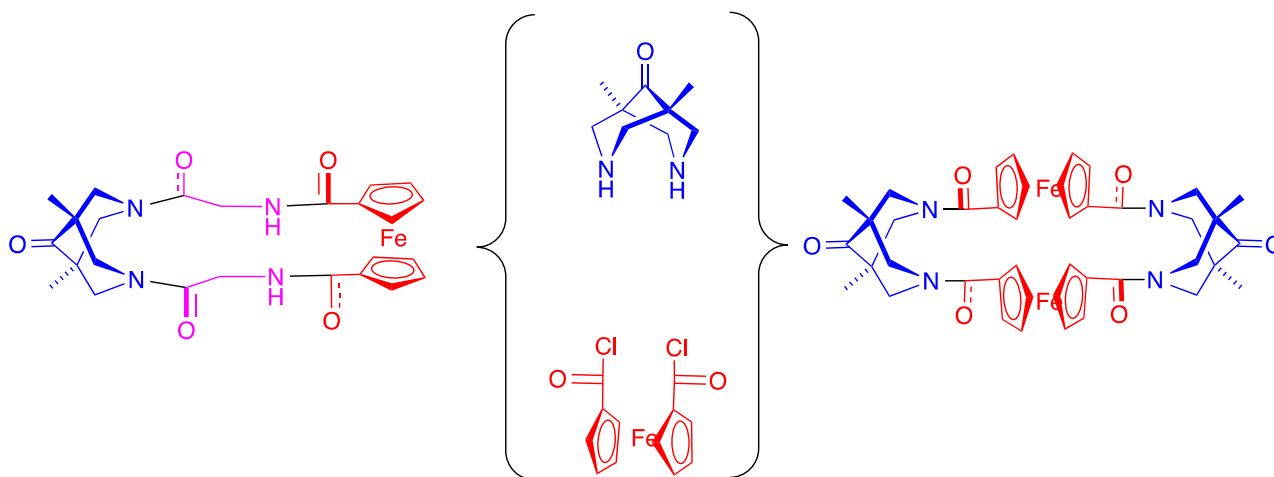
# МАКРОГЕТЕРОЦИКЛЫ НА ОСНОВЕ БИСПИДИНОВ

**Вацадзе С.З., Гайсен С.В., Калинин М.А., Николаева А.А., Медведько А.В.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
 119991, Москва, Ленинский проспект, 47  
 e-mail: vatsadze@ioc.ac.ru*

Построение новых хиральных макроциклов на основе новых хиральных строительных блоков и исследование их применения в распознавании хиральных соединений, самосборке и асимметричном катализе являются передовыми и актуальными направлениями исследований в химии макроциклов и, в целом, в супрамолекулярной химии. В продолжение наших исследований по синтезу и конформационному поведению макрогетероциклов<sup>1</sup> в данной работе внимание сосредоточено на создании молекулярных строительных блоков для дальнейшего их использования при конструировании новых макрогетероциклических рецепторов.

Например, соединение в одной молекуле биспидинового и ферроценового строительных блоков открывает путь к получению гибридных макрогетероциклов, соединяющих в одной структуре рецепторную химию биспидина и сенсорные возможности ферроценового ядра<sup>2</sup>:



В докладе будут рассмотрены известные циклофаны на основе биспидина и новые направления в этой химии, развиваемые в нашей лаборатории.

## Литература

1. Vatsadze S.Z., Krut'ko D.P., Blake A.J., Mountford, P. *Macroheterocycles*, 2017, **10**, 98-109; DOI: 10.6060/mhc161179v.
2. Medved'ko A.V., Krut'ko D.P., Gaisen S.V., Churakov A.V., Minyaev M.E., Moiseeva A.A., Lemenovsky D.A., Yu H., Wang L., Vatsadze S.Z. *Journal of Organometallic Chemistry*, 2021, **949**, 121945; DOI: 10.1016/j.jorganchem.2021.121945.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 21-53-53027.*

# ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ МОНОТЕРПЕНОИДОВ, НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ МЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ

**Волчо К.П.,<sup>a</sup> Ильина И.В.,<sup>a</sup> Сидоренко А.Ю.,<sup>b</sup> Ли-Жуланов Н.С.,<sup>a</sup> Патрушева О.С.,<sup>a</sup>  
Салахутдинов Н.Ф.<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения РАН,  
630090, Новосибирск, пр. Лаврентьева 9,  
e-mail: volcho@nioch.nsc.ru

<sup>b</sup> Институт химии новых материалов НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Монотерпеноиды, углеродный остов которых построен из двух изопреновых фрагментов, являются широко распространённой в природе важной группой природных соединений. Химическая модификация монотерпеноидов позволяет существенно усилить нативную активность или привести к появлению новых биологических свойств [1].

Нами разработаны синтетические подходы, позволяющие получить на основе монотерпеноидов разнообразные кислородсодержащие гетероциклические соединения с различными типами остовов. Среди синтезированных гетероциклических соединений обнаружены агенты, демонстрирующие высокую противоопухолевую, антивирусную, антипаркинсоническую или анальгетическую активность [2, 3].

Монотерпеноиды, как правило, имеющие несколько асимметрических центров определенной конфигурации и несколько функциональных групп, являются трудными объектами для селективной модификации [3]. Для решения этой проблемы нами, с использованием возможностей гетерогенного катализа, разработаны эффективные методы стереоселективного получения целевых соединений, выявлены факторы, влияющие на направление и селективность протекающих процессов [4, 5].

## Литература

1. Salakhutdinov N.F., Volcho K.P., Yarovaya O.I. *Pure Appl. Chem.*, 2017, **89**, 1105.
2. Il'ina I.V., Dyrkheeva N.S., Zakharenko A.L., Sidorenko A.Y., Li-Zhulanov N.S., Korchagina D.V., Chand R., Ayine-Tora D.M., Chepanova A.A., Zakharova O.D., Il'ina E.S., Reynisson J., Malakhova A.A., Medvedev S.P., Zakian S.M., Volcho K.P., Salakhutdinov N.F., Lavrik O.I. *Molecules*, 2020, **25**, 3496.
3. Патрушева О.С., Волчо К.П., Салахутдинов Н.Ф. *Успехи химии*, 2018, **87**, 771.
4. Sidorenko A., Kurban Yu.M., Il'ina I.V., Li-Zhulanov N.S., Korchagina D.V., Ardashov O.V., Wärnå J., Volcho K.P., Salakhutdinov N.F., Murzin D.Yu., Agabekov V.E. *Appl. Catal. A, Gen.*, 2021, **618**, 118144.
5. Sidorenko A.Yu., Kravtsova A.V., Mäki-Arvela P., Aho A., Sandberg T., Il'ina I.V., Li-Zhulanov N.S., Korchagina D.V., Volcho K.P., Salakhutdinov N.F., Murzin D.Yu., Agabekov V.E. *Mol. Catal.*, 2020, **490**, 110974.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-13-00040.

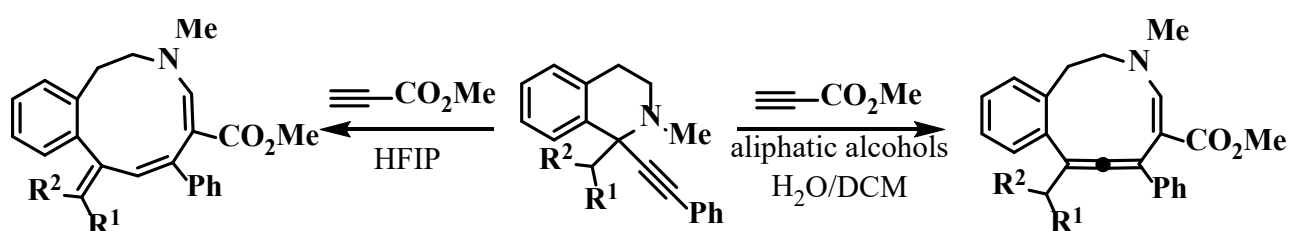


# ДОМИНО-РЕАКЦИИ В СИНТЕЗЕ И ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ АЗАГЕТЕРОЦИКЛОВ

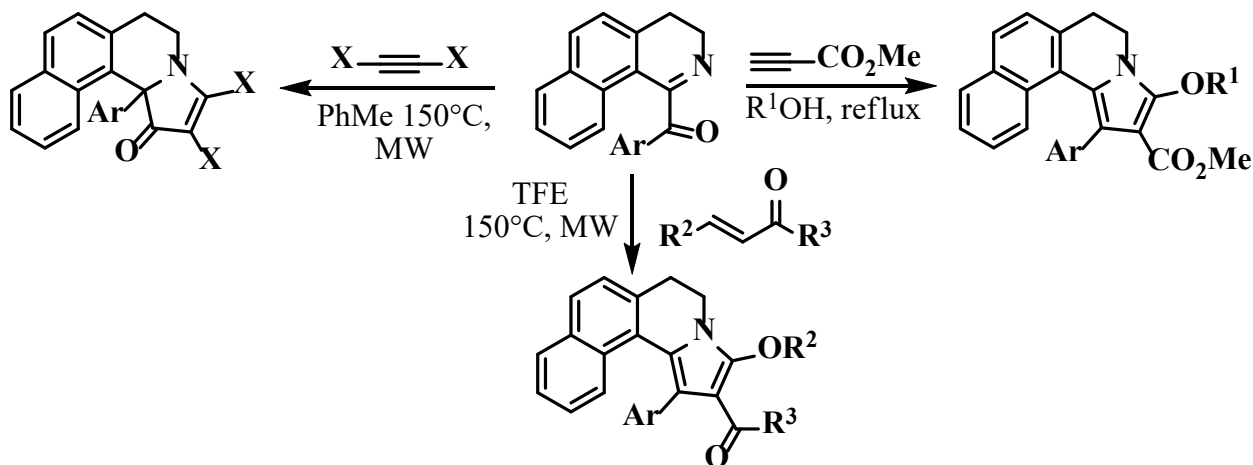
Воскресенский Л.Г.

Российский университет дружбы народов, 117198, Москва, Миклухо-Маклая 6,  
 e-mail: lvoskressensky@sci.pfu.edu.ru

Электронодефицитные алкины являются хорошо известными реагентами, часто применяемыми для получения гетероциклических соединений. Способные к разнообразным превращениям, активированные алкины нашли широкое применение в реакциях с насыщенными азагетероциклами. Относительно недавно было обнаружено, что взаимодействие 1-алкилзамещенных тетрагидроизохинолинов с активированными алкинами приводит к образованию циклических алленов<sup>1</sup> стабильных в стандартных условиях, но способных к дальнейшим превращениям при нагревании.



Наш интерес к химии активированных алкинов привел к появлению серии производных пирроло[2,1-а]изохинолина, была показана возможность их последующего превращения в 1-оксо-производные и алкоксипирролоизохинолины, а также возможность использования непредельных алкенов<sup>2</sup>. Дальнейшие исследования в этой области касаются реакционной способности 1,2-дизамещенных 2-имидазолинов под действием активированных алкинов.



## Литература

1. Titov A.A., Kobzev M.S., Borisova T.N., Listratova A.V., Evenko T.V., Varlamov A.V., Voskressensky L.G., *European Journal of Organic Chemistry*, **2020**, 3041-3049.
2. Ershova A.A., Zinoveva A.D., Borisova T.N., Titov A.A., Varlamov A.V., Voskressensky L.G., Nguyen V.T., Le T.A., *Tetrahedron Letters*, 2019, **60**, 151264.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 21-53-54002 вьет-а)

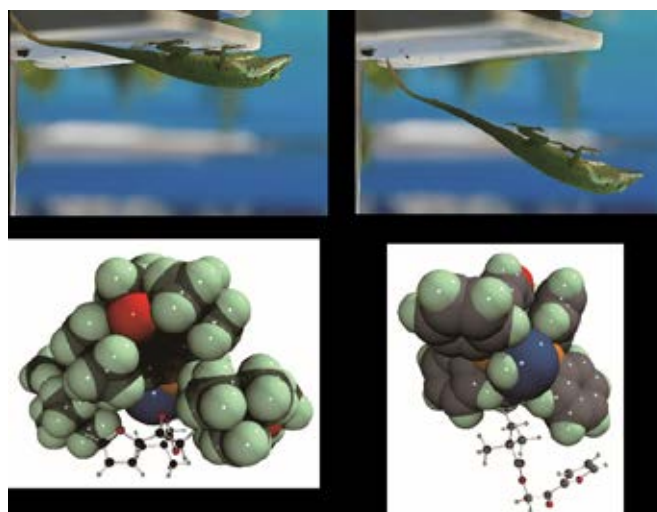


# ВАЖНОСТЬ ФУРАНОВОГО КОЛЬЦА КАК СТЕРЕОРЕГУЛИРУЮЩЕЙ ГРУППЫ В АСИММЕТРИЧЕСКОМ ГИДРИРОВАНИИ

[Гриднев И.Д.](#)

*Институт Органической Химии РАН им. Н. Д. Зелинского  
119991 Москва, Ленинский проспект 47  
E-mail: ilyaiochem@gmail.com*

Pd(II) комплекс (*R*)-DTBM-SegPHOS с многочисленными трет-бутильными заместителями катализирует асимметрическое гидрирование или разрыв связи C–O в  $\alpha$ -пivalоилокси-1-(2-фурил)этанон, в то время как незамещенный (*R*)-SegPHOS неспособен катализировать эти превращения. Обширная сеть нековалентных C–H $\cdots$ H–C взаимодействий, обеспеченная трет-бутилзамещенными фенильными кольцами в (*R*)-DTBM-SegPHOS приводит к повышению стабильности всех интермедиатов и переходных состояний в соответствующих каталитических циклах по сравнению с незамещенными аналогами. Образование первичного аддукта и его превращение в высокорекреакционноспособный интермедиат происходит по схеме сходной с соответствующими процессами, наблюдаемыми в природных энзиматических реакциях. DFT Расчеты показывают, что именно этот процесс является стереорегулирующим, так как лишь в случае приближения субстрата к реакционному центру со стороны одной из прохиральных плоскостей субстрата образуется стабильный интермедиат. Важность фурильной группы для эффективности асимметрического катализа будет раскрыта в докладе.



#### References:

1. J. Chen, I. D. Gridnev *iScience* **2020**, 100960.

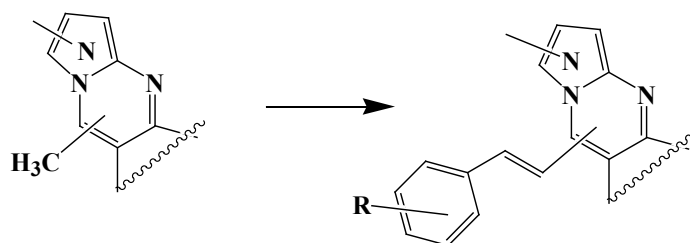
# СИНТЕЗЫ АННЕЛИРОВАННЫХ АЗОЛОПИРИМИДИНОВ С МОСТИКОВЫМ АТОМОМ АЗОТА И ИХ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ПУШ-ПУЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

[Данагулян Г.Г.](#),<sup>a, b</sup> Аракелян М.Р.<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Российско-Армянский (Славянский) университет, 0051, Ереван, ул. Овсена Эмина, 123, Армения  
e-mail: [gdanag@email.com](mailto:gdanag@email.com)

<sup>b</sup>НТЦ Органической и фармацевтической химии НАН РА, 0014, Ереван, пр. Азатутян, 26

Разработаны методы синтеза различных конденсированных систем, включающих азолопиримидины с узловым атомом азота и метильными группами. Реакцией ароматических альдегидов с синтезированными системами получены соединения с пролонгированной цепью сопряженных С=С связей.



Работа выполнена при финансовой поддержке ГКН РА и РФФИ (проект 20RF-138/20-53-05010 Art\_a), а также в рамках субсидии МОН РФ научной деятельности РАУ.

# ДIAЗОСУКЦИНИМИДЫ В СИНТЕЗЕ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

**Дарьин Д.В., Кантин Г.П., Красавин М.Ю.**

Санкт-Петербургский государственный университет,  
 Институт химии, Россия 198504, Санкт-Петербург, Университетский пр. 26,  
 e-mail: d.dariin@spbu.ru

Введение диазофункции в ядро гетероцикла открывает широкие возможности для последующей направленной функционализации цикла или построения нового гетероциклического каркаса. Недавно был разработан метод получения уникального класса диазогетероциклов – арилиден-замещенных диазосукцинимидов<sup>1,2</sup>. Эти диазореагенты оказались удобными исходными соединениями для синтеза широкого круга полигетероциклических систем, таких как индолизины, хромены, 2-бензазепины<sup>3</sup>, 2-бензоксепины, спиропираны<sup>4</sup> (Схема 1).

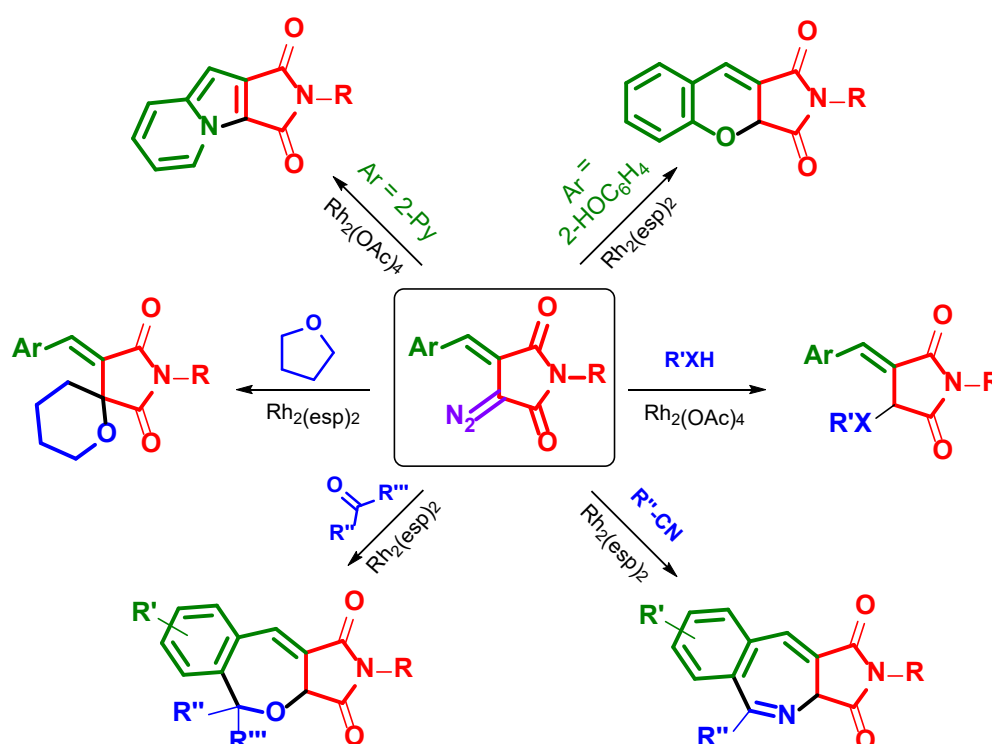


Схема 1. Примеры синтеза различных гетероциклических соединений на основе диазосукцинимидов.

## Литература

1. (a) Chupakhin E. G., Kantin G. P., Dar'in D. V., Krasavin M. *Mendeleev Commun.* 2021, **31**, 36; (b) Laha D., Bhat R. G. *Asian J. Org. Chem.* 2020, **9**(6), 918.
2. Chupakhin E., Gecht M., Ivanov A., Kantin G., Dar'in D., Krasavin M. *Synthesis* 2021, **53**, 1292.
3. Inyutina A., Dar'in D., Kantin G., Krasavin M. *Org. Biomol. Chem.* 2021, **19**, 5068.
4. Dar'in D., Kantin G., Bakulina O., Inyutina A., Chupakhin E., Krasavin M. *J. Org. Chem.* 2020, **85**, 15586.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-13-00024.

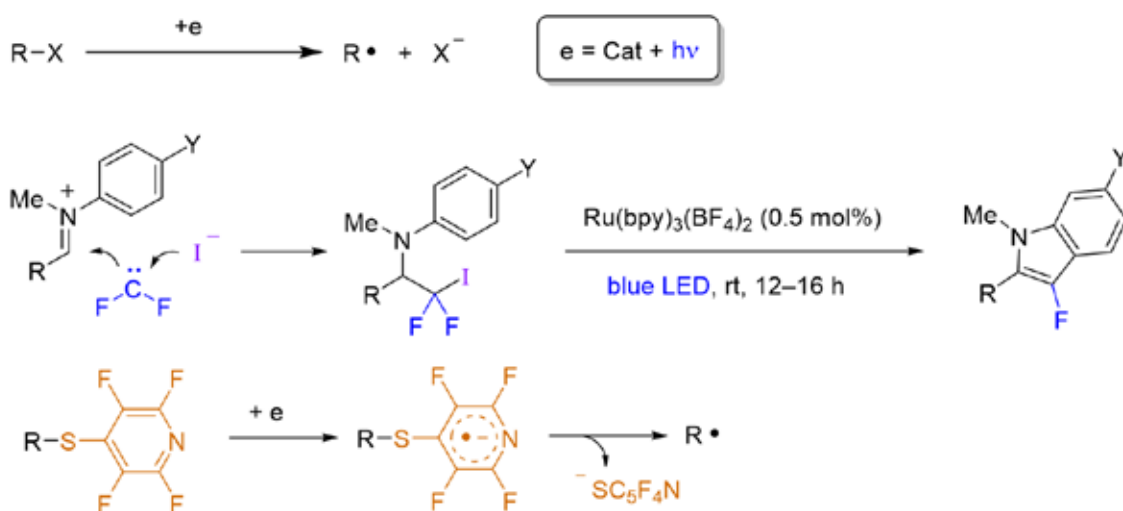
# ФОТОКАТАЛИЗ В СИНТЕЗЕ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Дильман А.Д.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: dilman@ioc.ac.ru*

Фотокаталитические процессы, которые включают генерацию свободных радикалов на основе разрыва связи углерод-гетероатом, могут эффективно использоваться для получения различных гетероциклических соединений. Атомы фтора и фторированные заместители зачастую способствуют протеканию фотокаталитических реакций за счет того, что они понижают потенциал восстановления субстратов, что приводит к более легкой генерации свободнорадикальных интермедиатов.

Нами разработана серия методов получения фторорганических гетероциклических соединений, которые проводятся в фотокаталитических условиях.<sup>1-3</sup> Мы также показали, что тетрафторпиридинилтио-фрагмент является эффективной группой для генерации алкильных радикалов.<sup>4</sup>



## Литература

1. Panferova, L. I.; Tsybal, A. V.; Levin, V. V.; Struchkova, M. I.; Dilman, A. D., *Org. Lett.* **2016**, *18*, 996–999.
2. Panferova, L. I.; Smirnov, V. O.; Levin, V. V.; Kokorekin, V. A.; Struchkova, M. I.; Dilman, A. D., *J. Org. Chem.* **2017**, *82*, 745–753.
3. Scherbinina, S. I.; Fedorov, O. V.; Levin, V. V.; Kokorekin, V. A.; Struchkova, M. I.; Dilman, A. D., *J. Org. Chem.* **2017**, *82*, 12967–12974.
4. Zubkov, M. O.; Kosobokov, M. D.; Levin, V. V.; Kokorekin, V. A.; Korlyukov, A. A.; Hu, J.; Dilman, A. D., *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 737–741.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-13-00112.*



# НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ПОСТРОЕНИЮ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕАКЦИИ МАННИХА

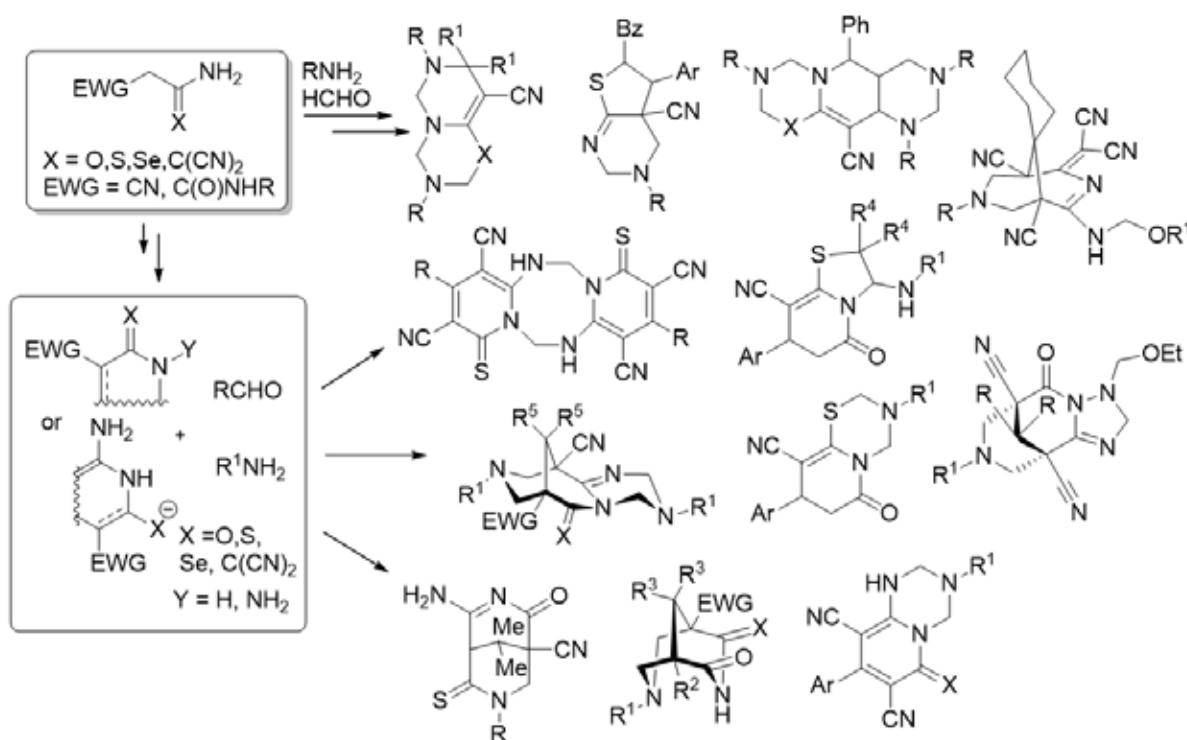
**Доценко В.В.,<sup>a,b</sup> Кривоколыско С.Г.,<sup>b</sup> Фролов К.А.,<sup>a</sup> Аксенов Н.А.,<sup>b</sup> Аксенова И.В.<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Кубанский государственный университет, 350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Россия,  
e-mail: victor\_dotsenko\_@mail.ru

<sup>b</sup>Северо-Кавказский федеральный университет, 355017, Ставрополь, ул. Пушкина 1, Россия

<sup>c</sup>Лаборатория «ХимЭкс», Луганский национальный университет им. Владимира Даля, 91034, Луганск, кв. Молодежный 20А, Луганская Народная Республика

В докладе представлены результаты авторского коллектива по изучению реакций аминотилирования широкого круга субстратов – производных метиленактивных тиаомидов и селеноамидов, а также димера малонитрила. Выявлены общие закономерности протекания реакции Манниха в ряду функциональных гетероциклических субстратов пиридинового ряда. Изучена биологическая активность ряда синтезированных продуктов, обнаружены соединения с антивирусным, аналептическим, противовоспалительным, антипиретическим действием.



Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (тема 0795-2020-0031).

# АЗОТСОДЕРЖАЩИЕ ГЕТЕРОЦИКЛЫ – СТРУКТУРНАЯ ОСНОВА УСТОЙЧИВЫХ ХИРАЛЬНЫХ АМИНОКАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ АСИММЕТРИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

Злотин С.Г., Кучеренко А.С.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, Российская  
федерация, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: zlotin@ioc.ac.ru*

Безметалльный асимметрический катализ (органокатализ) стал в последние годы одним из основных методов энантиоселективного синтеза органических соединений, наряду с металлокомплексным и биокатализом. Однако, относительно низкая активность органокатализаторов и, как следствие, необходимость их применения в значительном количестве существенно ограничивают практическое применение этого типа катализа в фармацевтической и химической промышленности. Нужны доступные, активные и устойчивые катализаторы, которые легко отделяются от продуктов и могут вводиться в процесс многократно.

Мы обнаружили, что активность и химическая устойчивость аминокатализаторов – наиболее распространенного типа органокатализаторов, а также энантиоселективность безметалльного катализа значительно улучшаются при включении в состав катализаторов азотсодержащих гетероциклов. Гетероциклические фрагменты способны образовывать ключевые енаминные и иминиевые интермедиаты и (или) нековалентные ассоциаты (водородные связи) с реагентами в переходном состоянии каталитической реакции, повышая уровень стереоиндукции<sup>1-6</sup>. Кроме того их можно использовать для формирования ионных групп, которые «гетерогенизуют» катализатор и облегчают его регенерацию<sup>7-9</sup>.

## Литература

1. 1. Kostenko A.A., Bykova K.A., Kucherenko A.S., Komogortsev A.N., Lichitsky B.V., Zlotin S.G., *Org. Biomol. Chem.*, **2021**, 19, 1780.
2. 2. Kucherenko A.S., Kostenko A.A., Komogortsev A.N., Lichitsky B.V., Fedotov M.Yu., Zlotin S.G., *J. Org. Chem.*, **2019**, 84, 4304.
3. 3. Kucherenko A.S., Kostenko A.A., Zhdankina G.M., Kuznetsova O.Yu., Zlotin S.G., *Green Chem.*, **2018**, 20, 754.
4. 4. Kochetkov S.V., Kucherenko A.S., Zlotin S.G., *Org. Biomol. Chem.*, **2018**, 16, 6423.
5. 5. Kostenko A.A., Kucherenko A.S., Komogortsev A.N., Lichitsky B.V., Zlotin S.G., *Org. Biomol. Chem.*, **2018**, 16, 9314.
6. 6. Vinogradov M.G., Turova O.V., Zlotin S.G., *Adv. Synth. Catal.* **2021**, 363, 1466.
7. 7. Tukhvatshin R.S., Kucherenko A.S., Nelyubina Y.V., Zlotin S.G., *ACS Catal.*, **2017**, 7, 2981.
8. 8. Tukhvatshin R.S., Kucherenko A.S., Nelyubina Y.V., Zlotin S.G., *Eur. J. Org. Chem.*, **2018**, 7000.
9. 9. Tukhvatshin R.S., Kucherenko A.S., Nelyubina Y.V., Zlotin S.G., *J. Org. Chem.*, **2019**, 84, 13824.

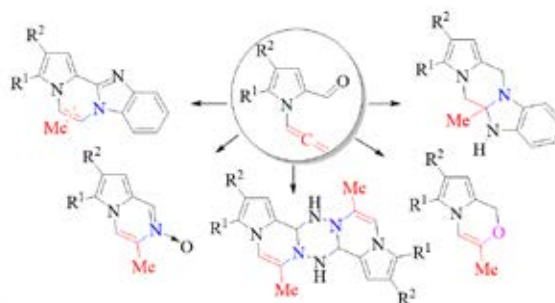
*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проекты 14-50-00126, 16-13-10470 и 16-13-10470-П) и Программы развития научных школ ИОХ РАН.*

# N-АЛЛЕНИЛПИРРОЛ-2-КАРБАЛЬДЕГИДЫ КАК ПЛАТФОРМА ДЛЯ СОЗДАНИЯ АННЕЛИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

**Иванов А.В., Мартыновская С.В.**

*Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН,  
ул. Фаворского, д.1, 664033, Иркутск, e-mail: ivanov@irioc.irk.ru*

Разработана новая универсальная методология построения широкого ряда различных аннелированных гетероциклических систем с пиррольным фрагментом на основе одного класса строительных блоков: ранее неизвестных<sup>1</sup> бифункциональных пирролов – *N*-алленилпиррол-2-карбальдегидов.



Показано, что реакция *N*-алленилпиррол-2-карбальдегидов с *o*-фенилендиамином приводит к образованию двух продуктов: ожидаемого 6-метилбензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пирроло[2,1-*c*]пиазина и неожиданного 5а-метил-5а,6-дигидро-5*H*,12*H*-бензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пирроло[1,2-*d*]пиазина. Разработан способ получения 5-метилбензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пирроло[2,1-*c*]пиазинов путем взаимодействия предварительно полученных пирролилбензимидазолов с пропаргилхлоридом в суперосновной системе КОН/ДМСО. Продемонстрирован простой и эффективный подход к ранее неизвестным замещенным 3-метилпирроло[1,2-*a*]пиазин-2-оксидам реакцией оксимирования *N*-алленилпиррол-2-карбальдегидов<sup>2</sup>. Получены высококонденсированные гетероциклы – тетразины – путем простой реакции *N*-алленилпиррол-2-карбальдегидов с гидразин гидратом. Показано, что в реакции пропаргилирования незамещенного *NH*-пирролилметанола образуется три продукта: *N*-алленилгидрокси-метилпирролы и их пропаргильные эфиры, а также аннелированные пирролооксазины<sup>3</sup>.

## Литература

1. Martynovskaya S. V., Shcherbakova V. S., Ushakov I. A., Borodina T. N., Ivanov A. V. *Tetrahedron Lett.*, 2020, **61**, 152666.
2. Ivanov A. V., Martynovskaya S. V., Shcherbakova V. S., Ushakov I. A., Borodina T. N., Bobkov Al. S., Vitkovskaya N. M. *Org. Chem. Front.*, 2020, **7**, 4019.
3. Vitkovskaya N. M., Bobkov, Al. S., Kuznetsova, S. V., Shcherbakova, V. S., Ivanov. A. V. *ChemPlusChem.*, 2019, **84**, 1.

# P,N-ГЕТЕРОЦИКЛЫ КАК НОВОЕ ПОКОЛЕНИЕ СТРУКТУРООБРАЗУЮЩИХ ЛИГАНДОВ ДЛЯ КООРДИНАЦИОННОЙ ХИМИИ

[Карасик А.А.](#)

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ОСП ФИЦ КазНЦ РАН,  
420088, Казань, Арбузова 8,  
karasik@iopc.ru*

P,N-гетероциклические лиганды с эндоциклическим фрагментом P-CH<sub>2</sub>-N, полученные за счет конденсации в трехкомпонентной системе фосфин-формальдегид-амин, привлекают особое внимание как удобная платформа для конструирования эффективных биомиметических катализаторов для электрохимических реакций восстановления и окисления водорода, а также превращения иных малых молекул, таких как O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> или N<sub>2</sub>.<sup>1-4</sup> Кроме того, циклическая структура лигандов предопределяет возможность использования их комплексов с металлами подгруппы меди для создания “stimuli responsive” люминесцентных сенсоров биомедицинского назначения.<sup>5-9</sup>

## Литература

1. Musina E.I., Khrizanforova V.V., Strel'nik I.D. et al. *Chem. Eur. J.*, 2014, **20**, 3169.
2. Khrizanforova V.V., Fayzullin R.R., Musina E.I. et al. *Mendeleev Commun.*, 2020, **30**, 302.
3. Kadirov M.K., Karasik A.A., Nizameev I.R. et al. *Energy Technol.*, 2018, **6**, 1088.
4. Kadirov M.K., Karasik A.A., Nizameev I.R. et al. *Energy Technol.* 2019, **7**, 1900020.
5. Strel'nik I.D., Dayanova I.R., Kolesnikov I.E. et al. *Inorg.Chem.*, 2019, **58**, 1048.
6. Dayanova I.R., Shamsieva A.V., Strel'nik I.D. et al. *Inorg. Chem.* 2021, **60**, 5402.
7. Shamsieva A.V., Kolesnikov I.E., Strel'nik I.D. et al. *J.Phys.Chem. C*, 2019, **123**, 25863.
8. Kalinichev A.A., Shamsieva A.V., Strel'nik I.D. et al. *Sensors and Actuators A*, 2021, **325**, 112722.
9. Elistratova J., Faizullin B., Strel'nik I. et al. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces* 2020, **196**, 111306.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ грант № 19-43-04119.*

# АЛКИЛЬНЫЙ СДВИГ В ПОСТРОЕНИИ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Климочкин Ю.Н.

*Самарский государственный технический университет*

Скелетные перегруппировки являются ценным инструментом органического синтеза, однако их роль в синтезе гетероциклических соединений на сегодняшний день недостаточно осознана химическим сообществом.

В докладе рассматриваются подходы к созданию неароматических гетероциклов различного размера и природы, в первую очередь конденсированных с каркасными полициклическими системами, основанные на перегруппировке Вагнера-Мейервейна и подобных трансформациях углеродного скелета в качестве ключевой стадии.

# МАКРОГЕТЕРОЦИКЛЫ: СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ В МЕДИЦИНЕ

[Койфман О.И.](#)<sup>а,б</sup>, Лебедева Н.Ш.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> *Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, 153000, г. Иваново, ул. Академическая, 1,  
E-mail: president@isuct.ru*

<sup>б</sup> *Ивановский государственный химико-технологический университет,  
153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, 7,*

Природные и синтетические порфирины в последнее время все активнее используются в различных областях медицины, и прежде всего в фотодинамической терапии онкологических заболеваний. Это требует постоянного внимания к синтезу новых фотосенсибилизаторов (ФС), отвечающих требованиям их применения в живых организмах.

Пандемия Covid-19 заставила взглянуть на возможность использования ряда ФС в лечении этого заболевания.

В связи с этим были проведены исследования взаимодействия неструктурных белков SARS-CoV-2 с соединениями порфиринового и хлоринового ряда для разработки лекарственных препаратов и расширения представлений о функциях неструктурных белков SARS-CoV-2.

Осуществлен молекулярный докинг белков ORF3a, ORF8, ORF10 к широкому ряду порфиринов, хлоринов, фталоцианинов, порфиразинов.

Для каждого изученного белка были выявлены соединения лидеры, обладающие потенциальной ингибирующей и фотонактивирующей активностью по отношению к мишеням.

Экспериментально с помощью спектральных и калориметрических методов доказано, что хлорин является конкурентным лигандом для эндогенных порфиринов (протопорфирин IX и железопротопорфирин IX) при связывании с дополнительными вирусными белками (ORF8, ORF3a) и может выступать в качестве ингибитора. Поэтому хлорин способен модулировать белок-белковые взаимодействия, и тем самым, возможно влиять на иммунный ответ хозяина. Таким образом, хлорин, используемый для лечения онкозаболеваний и разрешенный в медицинской практике может быть использован и для борьбы с COVID-19.

## Литература

1. Koifman O. I. et al. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 2021, **57**(4), 423.
2. Lebedeva N. S. et al. *Molecules*, 2020, **25**(19), 4368.
3. Koifman O. I. et al. *Macroheterocycles*, 2020, **13**(4).

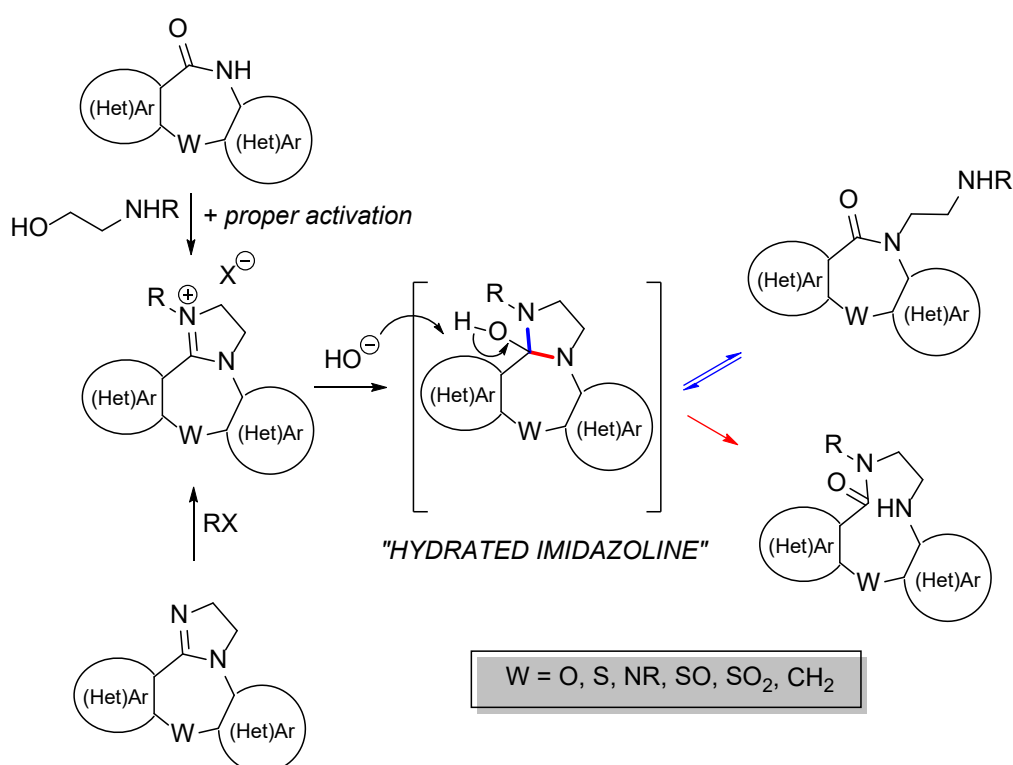
*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований № 20-04-60108.*

# MEDIUM-SIZED HETEROCYCLES THROUGH RING EXPANSION: NEW DEVELOPMENTS

[Krasavin M.](#), Sapegin A.

*Institute of Chemistry, Saint Petersburg State University, Peterhof 198504 Russia  
 m.krasavin@spbu.ru*

Our team developed a novel approach to medium-sized (10- to 13-membered) heterocycles which is based on the expansion of a heterocyclic system fused to an imidazoline or 2-hydroxyimidazoline cycle. Since the process is thought to be triggered by the addition of a water molecule to the imidazoline amidine carbon atom, we dubbed it ‘hydrated imidazoline ring expansion’ or HIRE. The talk will summarize the current state of affairs in this area of our research.



## References

1. *Org. Biomol. Chem.* **2017**, *15*, 2906-2909.
2. *J. Org. Chem.* **2018**, *83*, 9707-9717.
3. *Tetrahedron Lett.* **2019**, *60*, 20-22.
4. *J. Org. Chem.* **2019**, *84*, 1693-1705.
5. *Eur. J. Org. Chem.* **2020**, 5664-5676.
6. *Tetrahedron Lett.* **2020**, *61*, 152423.
7. *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 5778-5791.



# ДИАСТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОЕ АЦИЛИРОВАНИЕ РАЦЕМИЧЕСКИХ N-ГЕТЕРОЦИКЛОВ

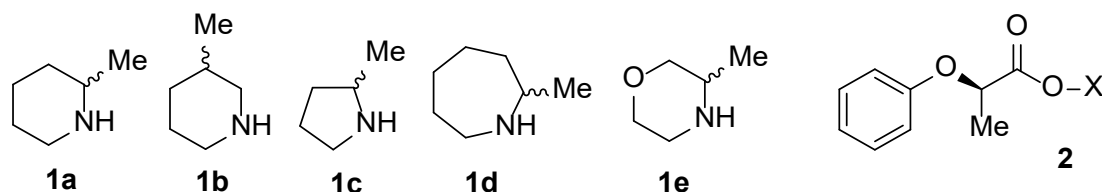
**Краснов В.П., Левит Г.Л., Чарушин В.Н.**

*Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,  
620108, Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской 22/20  
e-mail: ca@uran.ios.ru*

Методы кинетического разделения (КР), основанные на разности скоростей превращения энантиомеров рацемата в реакциях с асим-метрическим агентом и/или катализатором, входят в число наиболее современных и перспективных подходов к получению энантиомерно чистых веществ из рацематов.

Ранее нами предложены методы КР рацемических N-гетероциклов под действием хиральных разделяющих агентов (ХРА) - хлорангидридов легко доступных в оптически чистом виде хиральных кислот: 2-арилпропионовых кислот, N-защищенных 2-аминокислот, 2-арилоксикислот. В результате мы разработали удобные методы получения энантиомерно чистых (*ee* >99%) производных тетрагидрохинолина, бензоксазина, бензотиазина, индолина и др.<sup>1</sup>, в том числе представляющих практический интерес как полупродукты в синтезе лекарственных препаратов. На основе квантово-химических DFT-расчетов предложен механизм стереодифференциации в процессе КР<sup>2</sup>.

В последнее время нами показано, что КР рацемических N-гетероциклов, не содержащих ароматического фрагмента (соединения 1a-e), может быть достигнуто в реакции с активированными эфирами (R)-2-феноксипропионовой кислоты (2) в качестве ХРА.



Энантиомерно чистые N-гетероциклы использованы для синтеза конъюгатов пурина, обладающих высокой противовирусной активностью.

## Литература

1. Краснов В.П., Груздев Д.А., Левит Г.Л. *Кинетическое разделение рацемических аминов в результате ацилирования*. – Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2017. – 228 с. [https://www.rfbr.ru/rffi/ru/books/o\\_2053002](https://www.rfbr.ru/rffi/ru/books/o_2053002)
2. Korolyova M.A., Vakarov S.A., Kozhevnikov D.N., Gruzdev D.A., Levit G.L., Krasnov V.P. *Eur. J. Org. Chem.* **2018**, 4577-4585.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект 19-13-00231).*

## 3,4-ДИХЛОР-2(5H)-ФУРАНОНЫ В СИНТЕЗЕ O-, S-, N-ГЕТЕРОЦИКЛОВ И ОКСАТИАМАКРОЦИКЛОВ

[Курбангалиева А.Р.](#)

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008, Казань,  
ул. Кремлевская 18,  
e-mail: akurbang@kpfu.ru*

Гетероциклические соединения ряда 2(5H)-фуранона весьма разнообразны, обнаружены в природе и играют важную роль в поиске, дизайне и разработке новых фармакологически активных веществ. Данное исследование посвящено разработке селективных и препаративных методов синтеза азот- и серосодержащих функциональных производных пятичленных O- и N-гетероциклов ряда 2(5H)-фуранона и 3-пирролин-2-она. На основе доступных и реакционноспособных субстратов фуранонового ряда и серосодержащих моно- и бинуклеофильных реагентов предложены селективные методы получения продуктов тиолирования различного структурного типа – тиоэфиров, бис-тиоэфиров, тиолов, сульфонов, сульфоксидов, сернистых моно-, би- и трициклических спиро- и конденсированных соединений, несущих ненасыщенный  $\gamma$ -лактонный фрагмент, в том числе обладающих оптической активностью. Найдены прекурсоры фуранонового ряда, реагенты и условия протекания реакций макроциклизации, приводящие к образованию оксатиамакроциклических соединений состава 1:1 и 2:2.

Для синтеза новых производных 3-пирролин-2-она с серо- и азотсодержащими заместителями использован удобный и эффективный подход, основанный на реакциях аммонолиза и аминирования соответствующих 5-метокси-2(5H)-фуранонов. Применение в качестве реагентов оптически активных терпеновых спиртов и аминоспиртов позволило получить стереоизомерно чистые производные 2(5H)-фуранона и 3-пирролин-2-она, а также новые типы конденсированных N,O,S-гетероциклических систем, несущих фрагменты оксазолидина, индана, дитиана и  $\gamma$ -лактама.

Среди синтезированных соединений выявлены гетероциклы с выраженными антимикробными и антимикотическими свойствами, характеризующиеся высокой эффективностью в отношении микроорганизмов в составе биопленки. Показано повышение эффективности антибиотиков за счёт присутствия фуранонов против планктонных бактериальных клеток и клеток в составе биоплёнки.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности № 0671-2020-0063.*

# ПИРИДИЛЬНАЯ/2-ПИРИДИЛОКСИДНАЯ ГРУППА КАК ИНСТРУМЕНТ ДИНАМИЧЕСКОЙ СТАБИЛИЗАЦИИ РЕДОКС-СОСТОЯНИЙ НИТРОКСИЛЬНОГО РАДИКАЛА

Магдесиева Т.В., Левицкий О.А.

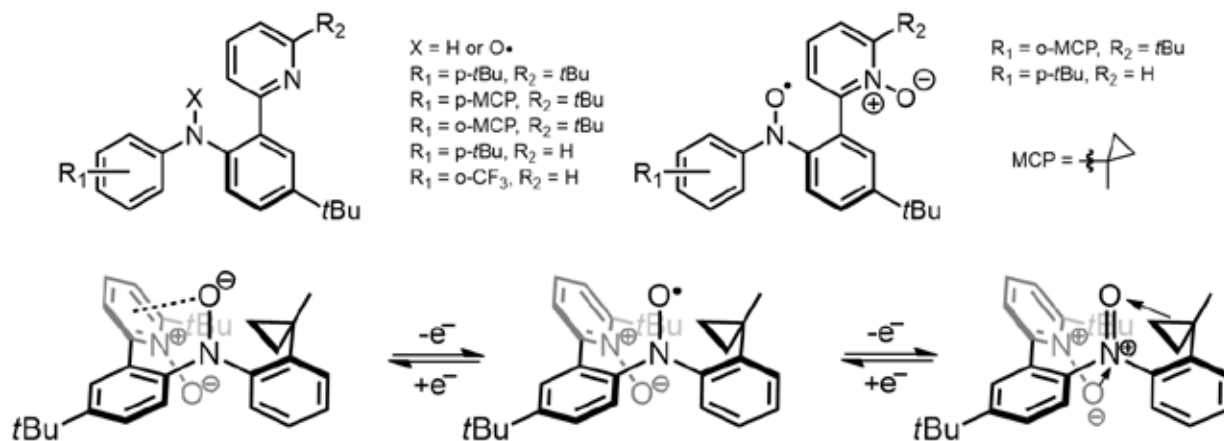
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
119991, Москва, Ленинские Горы 1/3,  
e-mail: [tvm@org.chem.msu.ru](mailto:tvm@org.chem.msu.ru)

Чисто органические молекулы, способные существовать в трех редокс-состояниях (катион, радикал и анион), крайне востребованы для создания амбиполярных редокс-активных материалов, транзисторов, и др. Между тем, стабилизация таких «антагонистических» редокс-состояний, как катион и анион - непростая задача, требующая направленного дизайна систем с большим «арсеналом инструментов» стабилизации, основанных как на ковалентных, так и нековалентных взаимодействиях. Это должна быть «умная» молекула, способная самопроизвольно менять свою геометрию и регулировать вклад донорной/акцепторной составляющей в стабилизацию редокс-активного центра, в зависимости от зарядового состояния функциональной группы.

Этот подход реализован нами при создании стабильных амбиполярных диарилнитроксильных радикалов. «Инструментом» стабилизации служит пиридилльная/2-пиридилоксидная группа в *орто*-положении одного из колец диарилнитроксила. Адаптивное конформационное поведение пиридилльной группы, основанное на «включении/выключении» электростатических и дисперсионных взаимодействий при изменении редокс-состояния нитроксильного радикала, позволило получить амбиполярные молекулы, образующие катионы и анионы, устойчивые, как минимум, в вольтамперометрических экспериментах.

Наличие пиридилльного фрагмента рядом с реакционным центром является причиной необычного поведения диариламинов (предшественников нитроксилов), за счет образования внутримолекулярной водородной связи.

Синтез и подробное спектральное, вольтамперометрическое и квантово-химическое исследование указанных соединений рассматривается в докладе.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-13-00094

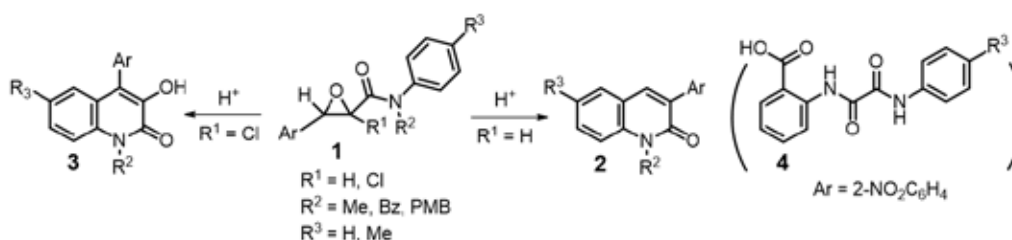
# НОВЫЕ ПУТИ СИНТЕЗА ХИНОЛИН(ОН)ОВ, В ТОМ ЧИСЛЕ ВИРИДИКАТИНА И ВИРИДИКАТОЛА, НА ОСНОВЕ АНИЛИДОВ ГЛИЦИДНОЙ КИСЛОТЫ

**Мамедов В.А., Мамедова В.Л., Галимуллина В.Р., Синяшин О.Г.**

*Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова – ОСП ФИЦ КазНЦ РАН,  
 420088 Казань, ул. Акад. Арбузова, 8  
 e-mail: mamedov@iopc.ru*

Хинолин-2-оны представляют собой важный класс гетероциклов, среди которых большое количество природных соединений, проявляющих широкий спектр фармакологических свойств, в связи с чем синтез хинолиновых производных привлекает внимание химиков-органиков и фармакологов.

Доклад посвящен новым методам синтеза 3- и 4-арилхинолин(он)ов **2** и **3**, в том числе природных алкалоидов *виридикатина* и *виридикатола*, из анилидов 3-арил- и 3-арил-2-хлорглицидной кислот, легко получаемых из ароматических альдегидов и анилидов моно- и дихлоруксусной кислот в условиях конденсации Дарзана. Кислотно-катализируемые внутримолекулярные циклизации анилидов 3-арил- и 3-арил-2-хлорглицидной кислот в хинолиноны сильно зависят от заместителей, введенных в анилидный компонент и в ароматическое кольцо альдегидного компонента и, по данным комбинированных экспериментальных и DFT-механических исследований, включают в себя три конкурирующих направлений на начальных стадиях: а) замыкание кольца через *ipso*-сайт, б) замыкание кольца через 1,2-Cl-сдвиг, с) замыкание кольца через *орто*-сайт.



## Литература

1. Mamedov V.A., Mamedova V.L., Kadyrova S.F., Khikmatova G.Z., Gubaidullin A.T., Rizvanov I.Kh., Latypov Sh.K. *Tetrahedron*, 2015, **71**, 2670.
2. Mamedov V.A., Mamedova V.L., Kadyrova S.F., Galimullina V.R., Khikmatova G.Z., Korshin D.E., Gubaidullin A.T., Krivolapov D.B., Rizvanov I.Kh., Bazanova O.B., Sinyashin O.G., Latypov Sh.K. *J. Org. Chem.*, 2018, **83**, 13132.
3. Qu Zh.-W., Zhu H., Katsyuba S.A., Mamedov V.A., Mamedova V.L., Grimme S. *ChemistryOpen*, 2020, **9**, 743.

*Работа поддержана грантом РФФ № 18-13-00315*

# РЕЦИКЛИЗАЦИИ ПОЛИКАРБОНИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ КАК МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ НОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

[Масливец А.Н.](#)

*Пермский государственный национальный исследовательский университет, ПГНИУ,  
Букирева, 15, Пермь, Россия,  
e-mail: koh2@psu.ru*

Исследованы нуклеофильные и перициклические превращения поликарбонильных соединений, диоксогетероциклов и гетерокумуленов на их основе, в том числе каскадные и мультикомпонентные гетероциклизации и рециклизации, реакции Дильса-Альдера и диполярного циклоприсоединения. Разработаны новые подходы к построению биологически подобных гетероциклических систем.

Каскадные нуклеофильные рециклизации и гетероциклизации поликарбонильных соединений и диоксогетероциклов (замещенных фуран-2,3-дионон, 1*H*-пиррол-2,3-дионон и гетарено[е]пиррол-2,3-дионон) представляют собой новые направления построения ранее недоступных и малодоступных карбонильных производных гетероциклов, конденсированных, мостиковых и разнообразных спиро-бис-гетероциклических систем.

Мультикомпонентные реакции 1*H*-пиррол-2,3-дионон, в том числе гетарено[е]пиррол-2,3-дионон – способ нуклеофильной «надстройки» пирролдиононового цикла спиро-гетероциклами различных типов.

Исследована токсичность, противомикробная, противовоспалительная, анальгетическая, антигипоксическая, психотропная и другие виды биологической активности представителей синтезированных соединений. Большинство из изучаемых соединений являются производными ацилпировиноградных кислот, структурно близких к естественным метаболитам живого организма, что обосновывает поиск биологически активных веществ среди продуктов синтеза.

В докладе представлены результаты более 40 опубликованных статей и более 10 полученных Патентов РФ на способы синтеза и физиологическую активность за 2018-2021 гг.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (проект № FSNF-2020-0008) и правительства Пермского края.*

# КАРКАСНЫЕ ФОСФОРАНЫ: ОСОБЕННОСТИ СИНТЕЗА, СТРОЕНИЯ И ГИДРОЛИТИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ

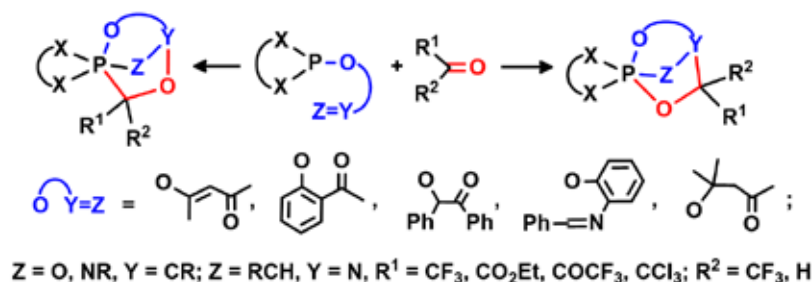
**Миронов В.Ф.<sup>а,б</sup>, Димухаметов М.Н.<sup>а</sup>, Ивкова Г.А.<sup>б</sup>**

<sup>а</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, 420088, Казань, ул. Арбузова, д. 8, e-mail: mironov@iopc.ru

<sup>б</sup>Казанский (приволжский) федеральный университет, 420008, Казань, ул. Кремлевская, д. 18.

Фосфораны (производные пентакоординированного атома фосфора) являются ключевыми интермедиатами в реакциях фосфорилирования и дефосфорилирования, протекающих в живой клетке, и играющих важную роль в ее энергетике, записи информации в виде ДНК и РНК и других процессах<sup>1</sup>. Они выступают в качестве ключевых интермедиатов многих важных для органического синтеза реакций. Именно поэтому синтезу и реакционной способности фосфоранов уделяется значительное внимание в литературе.

В докладе представлены последние данные, полученные авторами в области синтеза, строения и гидролитической устойчивости каркасных фосфоранов. Особенностью синтеза данных соединений является использование циклических производных P(III), содержащих C=O- или C=C-фрагмент в экзоциклическом заместителе, в каскадных процессах, инициируемых соединениями с активированными кратными связями<sup>2,3</sup>. Рассмотрены также PCO/POC-перегруппировка<sup>4-6</sup> в ряду каркасных фосфоранов и реакции циклоприсоединения виниловых эфиров кислот P(III) к карбонильным соединениям<sup>7</sup>. Проанализирована хемоселективность гидролиза каркасных фосфоранов.



## Литература

1. *Chemical Biology of Nucleic Acids: Fundamentals and Clinical Applications*. Ed. by V.A. Erdmann, W.T. Markiewicz, J. Barciszewski. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg. 2014. 599 p.
2. Миронов В.Ф., Димухаметов М.Н. и др. *Ж. общ. хим.* 2020, **90**, 1704.
3. Mironov V.F., Dimukhametov M.N. et al. *Chem. Commun.* **2021**. Doi 10.1039/D1CC02941J.
4. Миронов В.Ф., Димухаметов М.Н. и др. *Изв. АН. Сер. хим.* **2015**, 2517.
5. Mironov V.F., Dimukhametov M.N. et al. *J. Org. Chem.* 2016, **81**, 5837.
6. Khasiyatullina N.R., Mironov V.F. et al. *RSC Adv.* 2016, **6**, 85745.
7. Khasiyatullina N.R., Baronova T.A. et al. *Org. Chem. Front.* 2018, **5**, 3113.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-03-00730.

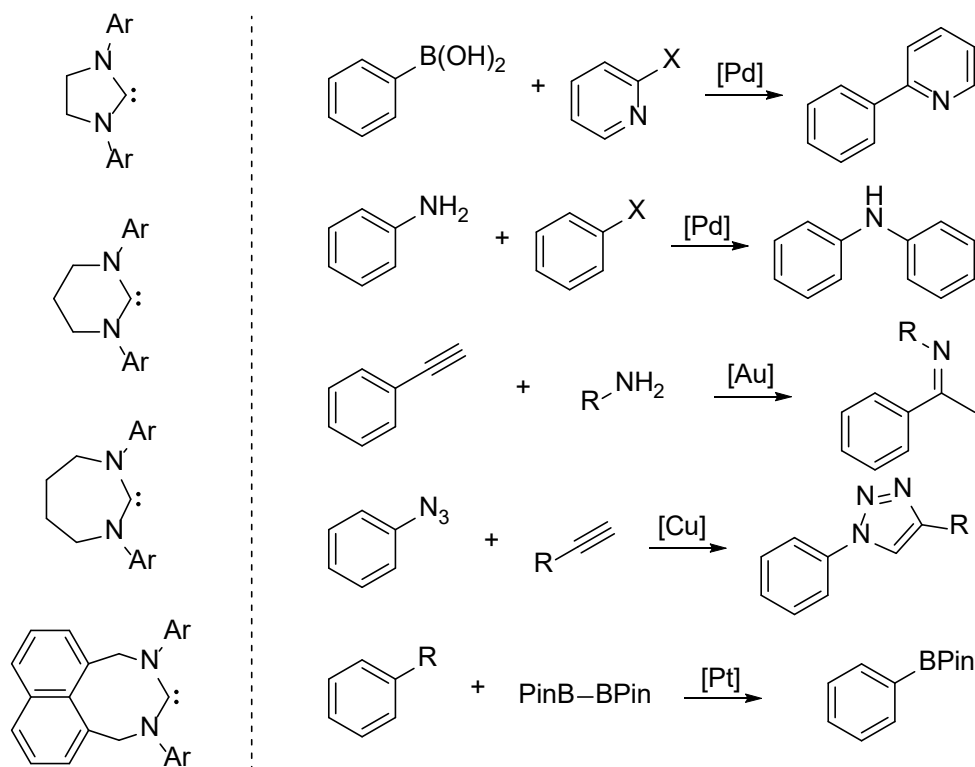
# N-ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ КАРБЕНЫ С РАСШИРЕННЫМ ЦИКЛОМ. ПРИМЕНЕНИЕ В КАТАЛИЗЕ ПОЗДНИМИ ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ

Нечаев М.С.,<sup>a,b</sup> Асаченко А.Ф.,<sup>a,b</sup> Топчий М.А.,<sup>a,b</sup> Ржевский С.А.

<sup>a</sup> Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 29

<sup>b</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, 1 (3)

Более десяти лет наша группа занимается химией N-гетероциклических карбенов, содержащих расширенные, шести-, семи- и восьмичленные циклы, ег-NHC. Стереозлектронные свойства таких карбенов можно менять в более широком диапазоне чем у их аналогов, содержащих пятичленные циклы. Мы разработали подходы к синтезу и выделению карбенов и их комплексов поздними переходными металлами (Cu, Ag, Au, Pd, Pt). На основе карбенов с расширенным циклом нам удалось разработать высокоэффективные каталитические системы для важных органических превращений, таких как кросс-сочетание C-C и C-N, присоединение нуклеофилов к ацетиленам, циклизация алкинов с азидами, борилирование по ароматическим C-H связям. Во многих случаях разработанные синтетические методы не только эффективны, но и отвечают требованиям «зеленой химии»: вода в качестве растворителя, реакции без использования растворителей, экологически безопасные и доступные со-катализаторы и добавки.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проекты 17-13-01076-П, 19-73-10185.

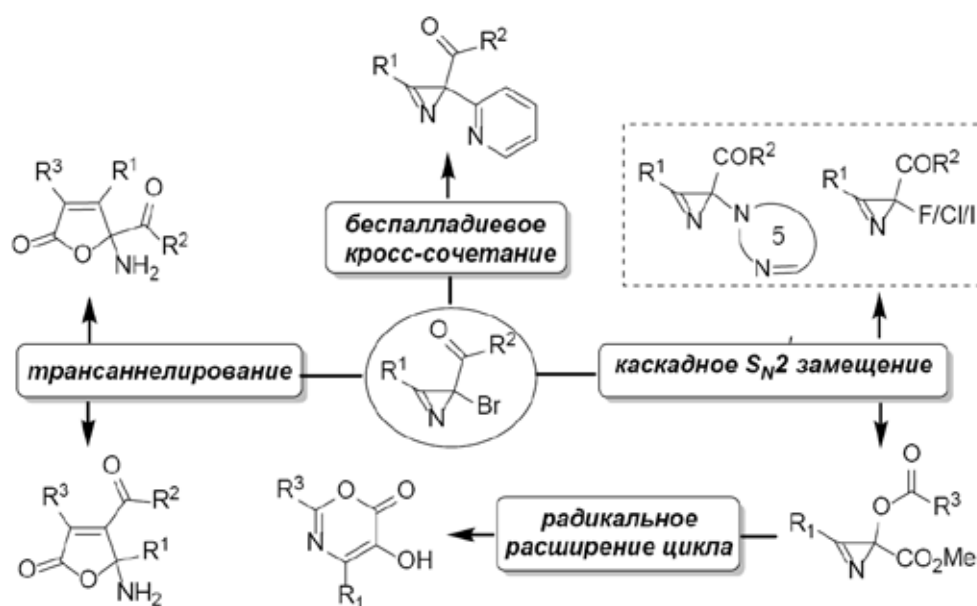


# НОВАЯ ХИМИЯ АЗИРИНОВ: РЕАКЦИИ $S_N2'$ , КРОСС-СОЧЕТАНИЯ И РАДИКАЛЬНОЕ РАСШИРЕНИЕ ЦИКЛА

Новиков М.С.

*Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет,  
 199034, Санкт-Петербург Университетская наб., 7/9,  
 e-mail: m.novikov@spbu.ru*

Синтетическая связка «формирование азиринового цикла–его трансформация» лежит в основе важной стратегии синтеза азотсодержащих ациклических и гетероциклических соединений разных классов<sup>1</sup>. Возможность селективно модифицировать полученное азириновое производное на промежуточной стадии без разрушения трехчленной азириновой системы выводит эту методологию на новый качественный уровень в решении многих проблем синтеза труднодоступных гетероциклических систем. В докладе обсуждаются новые эффективные способы модификации галогенированных азиринов с использованием каскадных реакций замещения  $S_N2'$  и беспалладиевой реакции Стилле, а также последние результаты по реакциям расширения азиринового цикла в ионных и свободнорадикальных условиях.



## Литература

1. Khlebnikov A.F., Novikov M.S., Rostovskii N.V. *Tetrahedron* 2019, **75**, 2555.

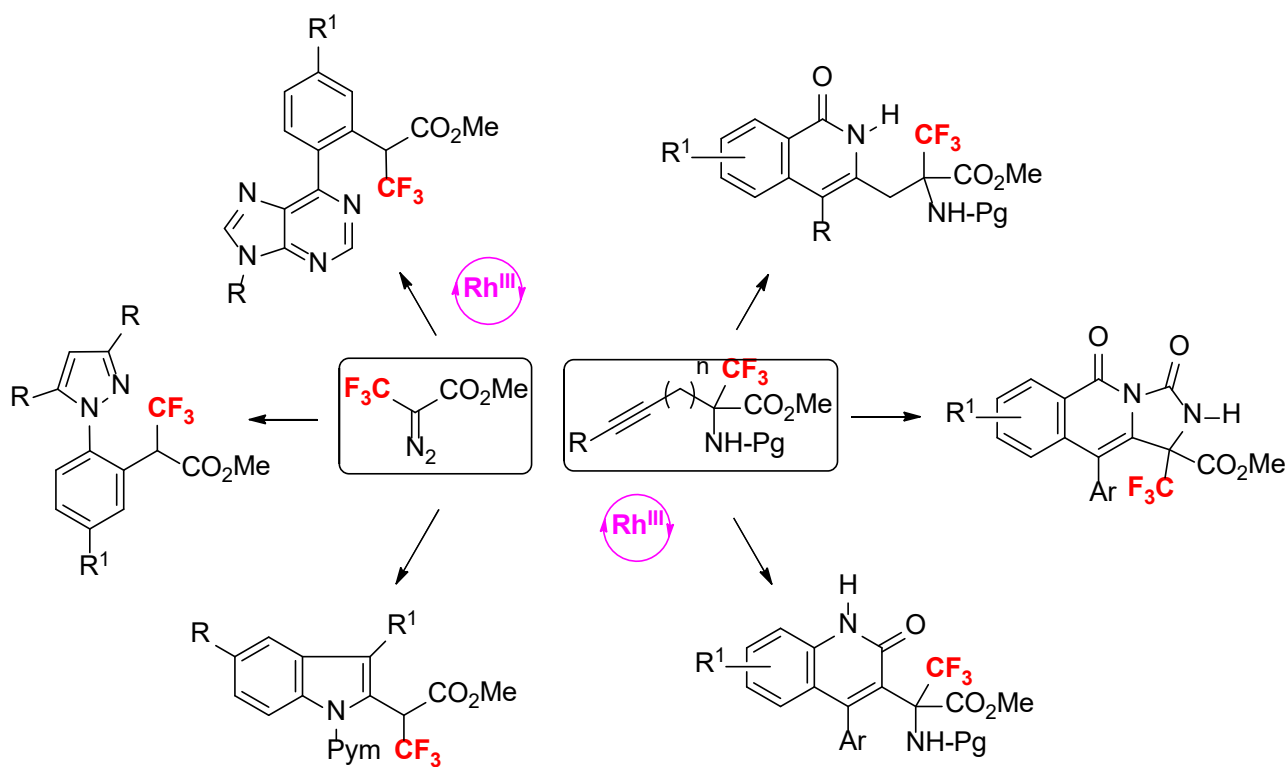
*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-13-00044. Исследования проводились с использованием оборудования ресурсных центров Санкт-Петербургского государственного университета: магнитно-резонансные методы исследования, методы анализа состава вещества, рентгенодифракционные методы исследования и вычислительный центр.*

# РОДИЙ-КАТАЛИЗИРУЕМАЯ АКТИВАЦИЯ С-Н СВЯЗЕЙ (ГЕТЕРО)АРЕНОВ В СИНТЕЗЕ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ МОЛЕКУЛ

Осипов С.Н., Воробьева Д.В., Петропавловских Д.А.

Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Вавилова 28,  
e-mail: osipov@ineos.ac.ru

Исследованы реакции  $\text{CF}_3$ -кабеноидной С-Н функционализации различных (гетеро)аренов, включая производные индола и пурина, а также реакции С-Н активации/аннелирования арилгидрооксаматов с  $\alpha\text{-CF}_3$ -замещенными  $\alpha$ -алкинил- $\alpha$ -аминокарбоксилатами при катализе комплексами Rh(III). Разработан эффективный метод введения трифторметилсодержащих функциональных групп в разнообразные ароматические и гетероароматические системы, обладающие потенциальной биологической активностью.<sup>1-4</sup>



## Литература

1. Iagafarova I.E., Vorobyeva D.V., Peregudov A.S., Osipov S.N. *Eur. J. Org. Chem.*, 2015, 4950.
2. Iagafarova I.E., Vorobyeva D.V., Loginov D.A., Peregudov A.S., Osipov S.N. *Eur. J. Org. Chem.*, 2017, 840.
3. Vorobyeva D.V., Vinogradov M.M., Nelyubina Yu.V., Loginov D.A., Peregudov A.S., Osipov S.N. *Org. Biomol. Chem.*, 2018, **16**, 2966.
4. Vorobyeva D.V., Petropavlovskikh D.A., Godovikov I.A., Nefedov S.E., Osipov S.N., *Eur. J. Org. Chem.*, 2021, 1883.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-13-00328.

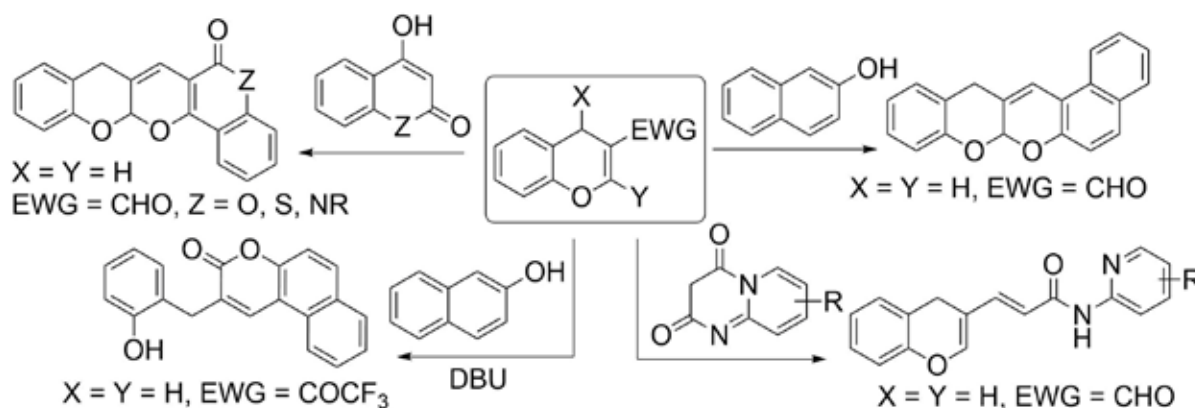
# ЭЛЕКТРОНОДЕФИЦИТНЫЕ 4H-ХРОМЕНЫ КАК СИНТЕТИЧЕСКАЯ ПЛАТФОРМА СТРУКТУРНОГО МНОГООБРАЗИЯ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Осянин В.А., Осипов Д.В., Семёнова И.А., Корженко К.С.

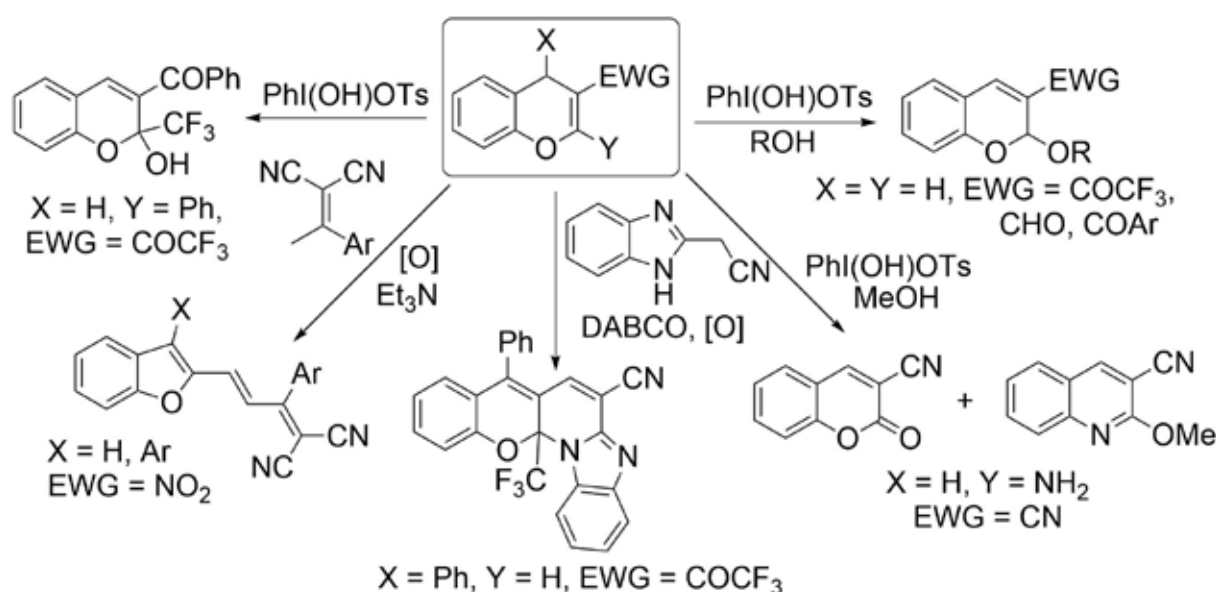
Самарский государственный технический университет, 443100,  
 Самара, ул. Молодогвардейская 244,  
 e-mail: VOsyenin@mail.ru

Наличие электроноакцепторной группы в β-положении 4H-хроменов резко увеличивает восприимчивость пиранового цикла к действию различных нуклеофилов, что делает эти соединения ценными строительными блоками в синтезе самых разнообразных гетероциклических соединений.

В докладе будут рассмотрены превращения пуш-пульных 4H-хроменов и их бензаналогов с различными моно- и бинуклеофилами, в которых происходит как раскрытие, так и сохранение пиранового цикла, а также каскадные превращения, включающие периклические процессы, например:



Кроме того, будут обсуждаться домино-процессы с участием окислителей (в первую очередь, соединений поливалентного иода) и нуклеофилов.



# ПОИСК НОВЫХ БЕЗОПАСНЫХ АНАЛЬГЕТИКОВ

**Павловский В.И.<sup>а,б</sup>, Леонов К.А.<sup>б</sup>**

<sup>а</sup> ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»  
634050, Россия, г. Томск,  
проспект Ленина, 30, e-mail: pavlovsky@tpu.ru

<sup>б</sup> ООО «Инновационные фармакологические разработки» (ООО «Ифар»)  
634021, Россия, г. Томск, ул. Елизаровых, 79/4

Поиск эффективных и безопасных анальгетиков является одной из актуальных задач биоорганической и медицинской химии. Известные на сегодняшний день анальгетики не отвечают указанным требованиям. Опиоидные анальгетики вызывают зависимость. НПВС имеют высокую токсичность и при длительном применении вызывают побочные эффекты.

Исследователи фирм Novartis<sup>1</sup> и Merck<sup>2</sup> провели изучение производных 1,4-бензодиазепина (БД) как антагонистов брадикининовых рецепторов (БК), проявляющих противовоспалительные свойства.

На основе молекулярного дизайна были спрогнозированы и синтезированы новые производные БД обладающие анальгетической активностью, но при этом проявляющие высокие психотропные свойства<sup>3</sup>.

Продолжая эти исследования томская компания «Ифар» разработала новый неопиоидный анальгетик PAV-0056<sup>4</sup> (рисунок 1), который находится на завершающей фазе доклинических исследований.

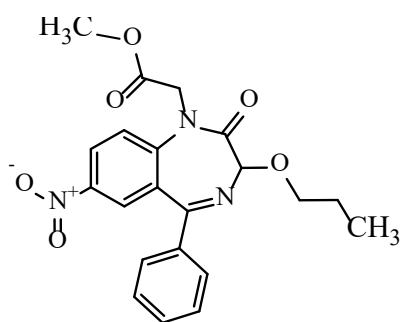


Рисунок 1. Структурная формула PAV-0056

PAV-0056 обладает высокой анальгетической активностью по тесту «уксусноислые корчи» ЭД<sub>50</sub> = 0,047 мг/кг при низкой токсичности ЛД<sub>50</sub> > 2000 мг/кг, не проявляет психотропных свойств, имеет низкий аффинитет к ЦБДР и ПБДР K<sub>i</sub> > 10000 nm. Механизм действия – антагонизм брадикининовых рецепторов.

## Литература

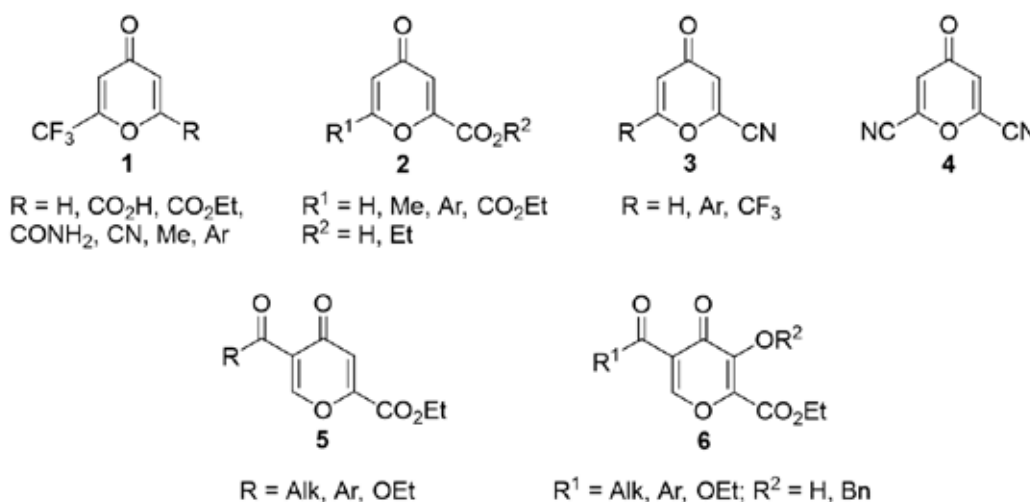
1. Dzlodulewicz E.K., Brown M.C. at. all. Bioorg. & Med. Chem. Lett. 9 (1999) 463-468.
2. Wood M.R., Kim J.J. at. all. J. Med. Chem. 2003, 46, 1803-1806
3. Pavlovsky V.I., Tsybalyuk O.V. at. all. Neurophysiology 45(5/6):427-432.
4. Павловский В.И., Хазанов В.А., Станкевич С.А. Патент 2701557 РФ, 2017.

# СИНТЕЗ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ 4-ПИРОНОВ

Сосновских В.Я., Обыденнов Д.Л.

*Институт естественных наук и математики Уральского федерального университета,  
620000 Екатеринбург, пр. Ленина 51,  
e-mail: vy.sosnovskikh@urfu.ru*

Поиск новых молекул с небольшой молекулярной массой и разнообразной реакционной способностью является важной задачей современного органического синтеза и имеет большое значение для медицинской химии и химии материалов. 4-Пироны, содержащие в своем составе электроноакцепторные группы, такие как  $\text{CF}_3$ ,  $\text{CO}_2\text{R}$ ,  $\text{COR}$ ,  $\text{CN}$ , относятся к высокоактивным полиэлектрофильным субстратам и представляют интерес для получения более сложных гетероциклических структур. В последние годы мы описали получение широкого ряда новых функционализированных 4-пиронов **1–6** и изучили их реакции с различными N-нуклеофилами, которые с высокой хемо- и региоселективностью ведут к синтезу азотсодержащих гетероциклов с интересными фотофизическими и биологическими свойствами [1–4].



## Литература

1. Obydenov D.L., Viktorova V.V., Chernyshova E.V., Shirinkin A.S., Usachev S.A., Sosnovskikh V.Y. *Synthesis*, 2020, **52**, 2267.
2. Obydenov D.L., Khammatova L.R., Steben'kov V.D., Sosnovskikh V.Y. *RSC Advances*, 2019, **9**, 40072.
3. Obydenov D.L., Chernyshova E.V., Sosnovskikh V.Y. *J. Org. Chem.*, 2019, **84**, 6491.
4. Obydenov D.L., Simbirtseva A.E., Piksin S.E., Sosnovskikh V.Y. *ACS Omega*, 2020, **5**, 33406.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 18-13-00186.*

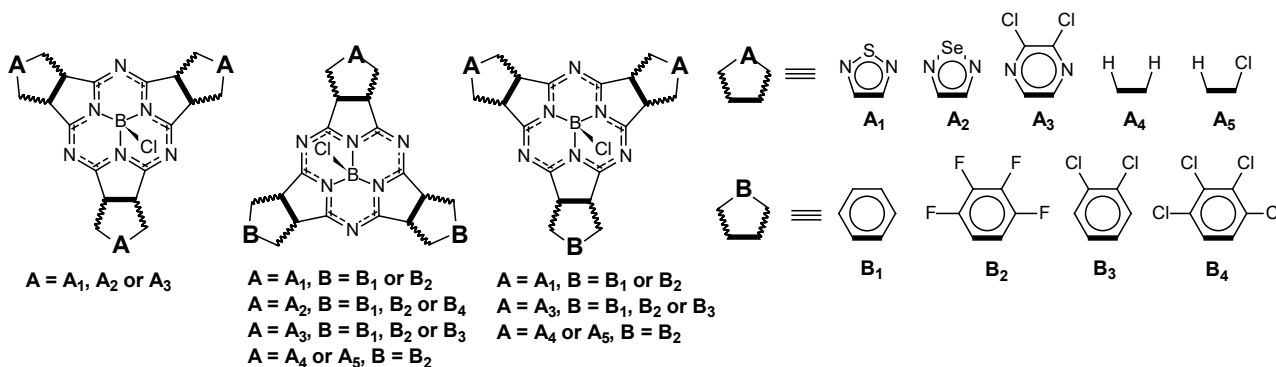
# ГАЛОГЕНЗАМЕЩЕННЫЕ СУБПОРФИРАЗИНЫ И ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ АНАЛОГИ СУБФТАЛОЦИАНИНА

Стужин П.А.

Ивановский государственный химико-технологический университет,  
153000, Иваново, Шереметевский проспект 7,  
e-mail: stuzhin@isuct.ru

Субфталоцианины (sPc) активно исследуются как перспективные материалы для применения в органической электронике. В то время как незамещенный sPc обычно используется в качестве донора p-типа, его галогензамещенные, проявляя проводимость n-типа, являются эффективными акцепторами.<sup>1,2</sup>

Нами впервые получены гетероциклические аналоги субфталоцианина, содержащие вместо бензольных колец пиразиновые или 1,2,5-тиа(селена)диазольные фрагменты,<sup>3-5</sup> а также серия субпорфиразинов сочетающих гетероциклические и галогензамещенные бензольные фрагменты.<sup>6-8</sup>



Гетероатомное замещение в субфталоцианине сильно увеличивает электронное сродство субпорфиразинового макроцикла, а сочетание гетероциклического аннелирования и галогенирования позволяет регулировать его акцепторные свойства в широких пределах. Продемонстрированы перспективы применения новых субпорфиразинов в безфуллереновой фотовольтаике.

## Литература

1. Stuzhin P.A. Fluorinated Phthalocyanines and Their Analogues. In: *Fluorine in Heterocyclic Chemistry*, Vol. 1 / Edited by V. G. Nenajdenko. Heidelberg: Springer, 2014, 621.
2. Pakhomov G.L., Travkin V.V., Stuzhin P.A. Hexachlorinated Boron(III) Subphthalocyanine as Acceptor for Organic Photovoltaics: A Brief Overview. In: *Recent Advances in Boron-containing Materials*, London, IntechOpen, 2019. <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.90292>
3. Hamdoush M., Ivanova S.S., Pakhomov G.L., Stuzhin P.A. *Macroheterocycles*, 2016, **9**, 230.
4. Stuzhin P.A., Skvortsov I.A., Zhabanov Y.A. et al *Dyes Pigments*, 2019, **162**, 888.
5. Hamdoush M., Nikitin K., Stuzhin P.A. et al. *Dyes Pigments*, 2019, 107584.
6. Hamdoush M., Skvortsov I.A., Stuzhin P.A. et al *J. Fluor. Chem.* 2017, **204**, 31.
7. Pakhomov G.L., Travkin V.V., Hamdoush M., et al. *Macroheterocycles* 2017, **10**, 548.
8. Hamdoush M., Somov N.V., Ivanova S.S., Stuzhin P.A. *Macroheterocycles*, 2020, **13**, 19.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 17-13-01522п.

# С–Н ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ N-ОКСИДОВ НЕАРОМАТИЧЕСКИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

[Сухоруков А. Ю.](#)<sup>а,б,в</sup>

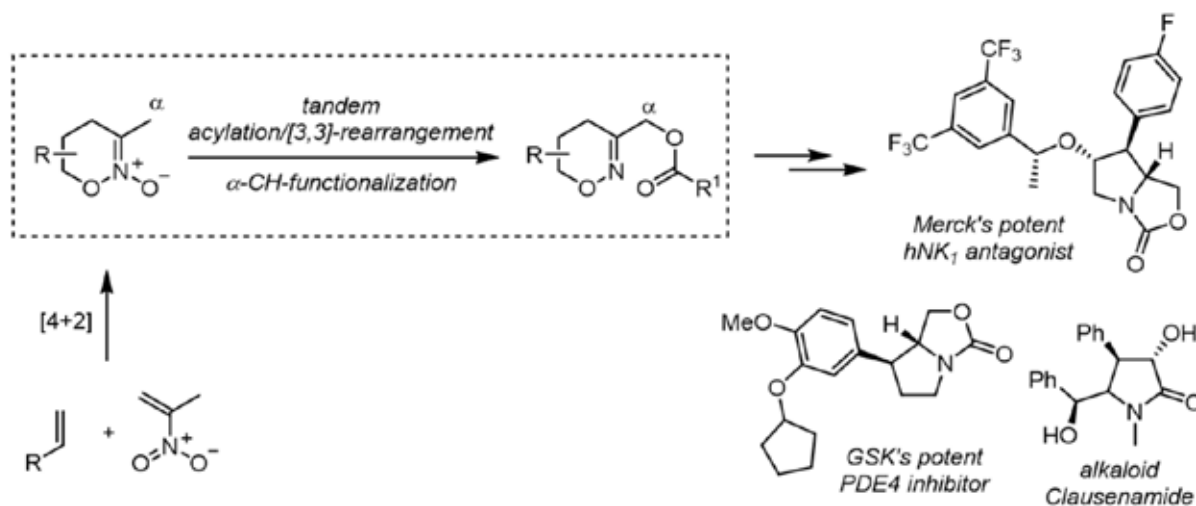
<sup>а</sup> ИОХ им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект 47

<sup>б</sup> РХТУ им. Д. И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская пл. 9

<sup>в</sup> РЭУ им. Г. В. Плеханова, Москва, 117997, Стремянный пер., д. 36

e-mail: [sukhorukov@ioc.ac.ru](mailto:sukhorukov@ioc.ac.ru)

Процессы С–Н функционализации в *N*-оксидах ароматических гетероциклов, приводящие к образованию новых связей углерод-гетероатом за счет деоксигенирования лабильного N–O фрагмента, находят широкое применение в синтезе фармакологически активных субстанций и материалов.<sup>1</sup> В то же время, для неароматических *N*-гетероциклических систем подобные превращения практически не разработаны.



В докладе будет рассмотрена общая методология функционализации  $\alpha$ -положения в 1,2-оксазин- и изоксазолин-*N*-оксидах с использованием тандемного процесса ацилирование/[3,3]-сигматропная перегруппировка.<sup>2,3</sup> Будут продемонстрированы примеры использования этой методологии в стереоселективном полном синтезе сложных биоактивных соединений и природных соединений.<sup>3,4</sup>

## Литература

1. R. S. Malykhin, A. Yu. Sukhorukov, *Adv. Synth. Catal.*, **2021**, doi: 10.1002/adsc.202100284.
2. A. Yu. Sukhorukov, *Adv. Synth. Catal.*, **2020**, 362, 724.
3. V. S. Dorokhov, Yu. V. Nelyubina, S. L. Ioffe, A. Yu. Sukhorukov, *J. Org. Chem.*, **2020**, 85, 11060.
4. A. O. Kokuev, Y. A. Antonova, V. S. Dorokhov, I. S. Golovanov, Y. V. Nelyubina, A. A. Tabolin, A. Y. Sukhorukov, S. L. Ioffe, *J. Org. Chem.*, **2018**, 83, 11057.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 17-13-01411.



# СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСААЗАИЗОВЮРЦИТАНА

Сысолятин С.В.

*Институт проблем химико-энергетических технологий  
Сибирского отделения Российской академии наук,  
Алтайский край, г. Бийск, ул. Социалистическая, д. 1,  
admin@ipcet.ru*

Интерес к гетероциклическим (N,O) соединениям, содержащим тетрацикло [5,5,0,0<sup>3,11</sup>0<sup>5,9</sup>] додекановый каркас, вызван их возможным использованием в качестве перспективных высокоэнергетических соединений и биологически активных соединений.

Синтез гексаазаизовюрцитанов легко осуществляется каскадной конденсацией глиоксаля с подходящими аминами и амидами. Наиболее хорошо изучена конденсация глиоксаля с производными бензиламина.

Нами была также изучена кислотнo катализируемая конденсация ряда замещённых сульфониламидов с глиоксалем с целью получения гетероциклов содержащих и оксаазаизовюрцитановый каркас.

Исследована возможность перефункционализации терминальных заместителей в гексаазаизовюрцитане. Описаны преимущественно реакции переацилирования и гидрогенолиза различных бензильных заместителей. Наблюдается селективность замещения в зависимости от стерических затруднений. Свободные =NH группы имеют слабоосновный характер и легко, подвергаются алкилированию и ацилированию.

Полициклические амины представляю интерес в первую очередь как высокоэнергетические соединения в качестве компонентов взрывчатых составов, порохов и твердых ракетных топлив. В России и за рубежом начаты исследования по диверсификации производств таких веществ с получением лекарственных соединений.

Ацилированием тетраацетилгексаазаизовюрцитана хлорангидридами некоторых карбоновых кислот получены соединения, проявляющие высокую биологическую активность.

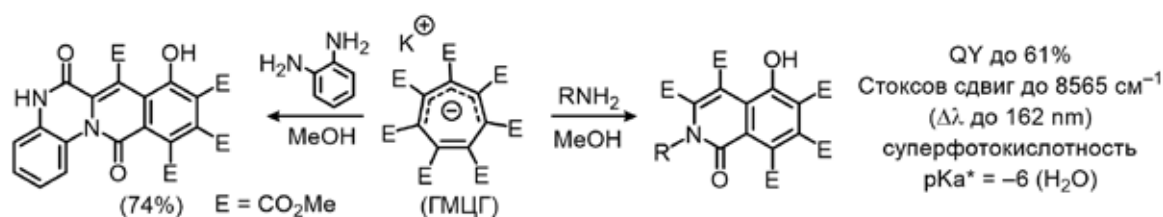
Для фармацевтической субстанции 4-(3,4-дибромтиофенкарбонил)-2,6,8,12-тетраацетил-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло [5,5,0,0<sup>3,11</sup>,0<sup>5,9</sup>] додекана, обладающего анальгетической активностью и готовой лекарственной формы (капсула, 120 мг) проведен полный спектр доклинических исследований.

# ГЕПТА(МЕТОКСИКАРБОНИЛ)ЦИКЛОГЕПТРАТРИЕНИД КАЛИЯ И ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫЕ ЦИКЛОПРОПАНЫ И ИХ АНАЛОГИ В СИНТЕЗЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Томилов Ю.В.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: tom@ioc.ac.ru*

Разработаны простые препаративные методы синтеза *N*-замещённых пента(метоксикарбонил)-5-гидроксиизохинолонов (в том числе *N*-аминопроизводных), основанные на взаимодействии гепта(метоксикарбонил)циклогептатриенида калия (ГМЦГ) с широким кругом аминов, анилинов и гидразидов кислот. Реакция ГМЦГ с 1,2-фенилендиаминном протекает аналогично и сопровождается дополнительной циклоконденсацией<sup>1</sup>. Обнаружено, что электронодефицитные 5-гидроксиизохинолоны обладают ярко выраженными флуоресцентными свойствами и являются одними из сильнейших исследованных к настоящему моменту суперфотокислот – соединений с повышенной кислотностью в возбужденном состоянии при слабой кислотности в основном.



Будет представлена также разработка новых синтетических методов конструирования гетероциклических соединений на основе реакций активированных циклопропанов и алкенов, в том числе с использованием соединений галлия. Будут рассмотрены новые необычные превращения ДАЦ, стирилмалонатов и метилиденмалонатов с альдегидами, азидами и ненасыщенными имидами<sup>2,3</sup>. Основная концепция заключается в использовании эксклюзивной реакционной способности соединений Ga для активации и катализа, что позволяет создать широкий круг разнообразных процессов сборки кислород- и азотсодержащих 5-, 6- и 8-членных гетероциклических соединений, перспективных для дальнейшего синтетического использования.

## Литература

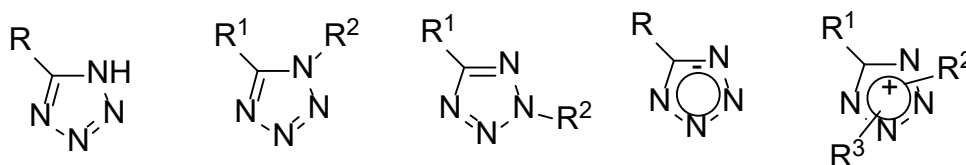
1. Belyy A.Y., Platonov D.N., Salikov R.F., Trainov K.P., Medvedev M.G., Luponosov Y.N., Svidchenko E.A., Tomilov Y.V. *Dyes and Pigments*, 2021, **187**, 109107.
2. Borisov D.D., Novikov R.A., Tomilov Y.V., *J. Org. Chem.*, 2021, **86**, 4457–4471.
3. Sergeev P.G., Novikov R.A., Tomilov Y.V., *Adv. Synth. Catal.*, 2021, **363** DOI: 10.1002/adsc.202100453.

# ТЕТРАЗОЛЫ КАК АККУМУЛЯТОРЫ ХИМИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ

**Трифонов Р.Е., Павлюкова Ю.Н., Островский В.А.**

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),  
190013, Санкт-Петербург, Московский просп. 26  
e-mail: rost\_trifonov@mail.ru*

Тетразолы заметно выделяются среди других полиазотистых гетероциклических систем. Так, в незамещенном 1H-тетразоле содержится около 80% азота. При этом само это соединение является весьма термически и химически устойчивым. Можно выделить несколько принципиальных структурных типов производных тетразола: NH-незамещенные тетразолы, 1- и 2-изомеры замещенных тетразолов, тетразолиды и изомерные тетразолиевые соли. В зависимости от положения и природы заместителей в гетероцикле свойства соединений данного ряда кардинально различаются.



Тетразолы широко применяются в технике и медицине. При разложении тетразольного цикла выделяется значительное количество энергии и газообразных продуктов. Это обстоятельство определило возможность использования ряда тетразолов в качестве энергоемких соединений<sup>1</sup>. Многие производных тетразола являются также биологически активными веществами и некоторые из них используются в медицине в качестве лекарственных средств<sup>2</sup>.

В последнее время интенсивно исследуются возможности практического использования запасенной в тетразольной системе энергии для активации различных химических и биохимических процессов. Особенности процессов деструкции тетразолов под действием термического нагрева или различных видов излучения обсуждаются в докладе.

## **Литература**

1. Ostrovskii V.A., Popova E.A., Trifonov R.E. *Adv. Heterocycl. Chem.*, 2017, **123**, 1.
2. Попова Е.А., Трифонов Р.Е., Островский В.А. *Успехи Химии*, 2019, **88**, 644.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты 20-53-00039-Bel\_a и 20-53-05010 Arm\_a.*



# ФОТОУПРАВЛЯЕМЫЕ ТРАНСФОРМАЦИИ ГЕТЕРОСТИЛЬБЕНОВ КАК МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Федорова О.А., Сайфутярова А.Е., Гулакова Е.Н., Федоров Ю.В.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской  
Академии Наук, 119991, Москва, ул. Вавилова 28  
e-mail: fedorova@ineos.ac.ru*

Производные гетеростильбенов привлекают большое внимание исследователей, поскольку демонстрируют широкий спектр свойств, благодаря которым они находят применение в медицине, биологии, производстве красителей различного назначения. Молекулы гетеростильбена фотоактивны и способны участвовать в таких фотохимических реакциях, как фотоизомеризация, фотодимеризация, внутримолекулярная фотохимическая циклизация. Возможность управления направлением фототрансформации обеспечивает возможность получать в одну стадию из доступных гетеростильбеновых производных различные сложные по структуре производные. В докладе представлены возможности проведения селективного фотохимического синтеза путем варьирования структуры гетеростильбена. Введение подходящих заместителей также использовалось для влияния на фотофизические характеристики гетеростильбенов. Переключение фотофизических свойств обеспечило возможность использования гетеростильбенов в качестве люминесцентных фрагментов в составе терапевтических агентов в фотодинамической терапии рака, оптических сенсоров, органических полупроводниковых материалов.



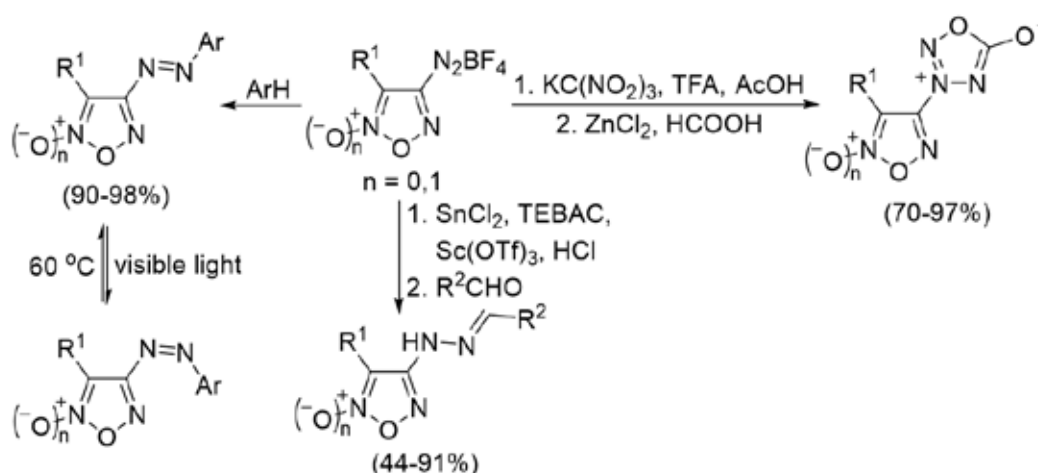
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-73-20158.

# 1,2,5-ОКСАДИАЗОЛЫ КАК ПЛАТФОРМА В СИНТЕЗЕ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ И ЭНЕРГОЕМКИХ ВЕЩЕСТВ

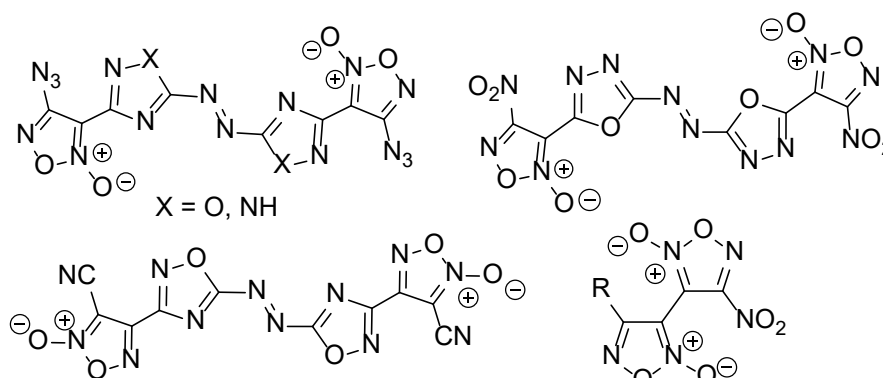
**Ферштат Л.Л., Ларин А.А., Жилин Е.С., Быстров Д.М., Махова Н.Н.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: fershtat@bk.ru*

1,2,5-Оксадазолы (фуразаны) и их *N*-оксиды (фуроксаны) являются важными структурными блоками в синтезе как фармакологически активных, так и высокоэнергетических веществ. В докладе представлены последние достижения нашей научной группы по исследованию синтетического потенциала (1,2,5-оксадазолил)дiazониевых солей в синтезе фармакологически активных структур.



Кроме того, нами предложены удобные подходы к сборке новых безводородных полиазот-кислородных гетероциклических систем, представляющих интерес в качестве компонентов различных энергоемких составов.



*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-20074.*

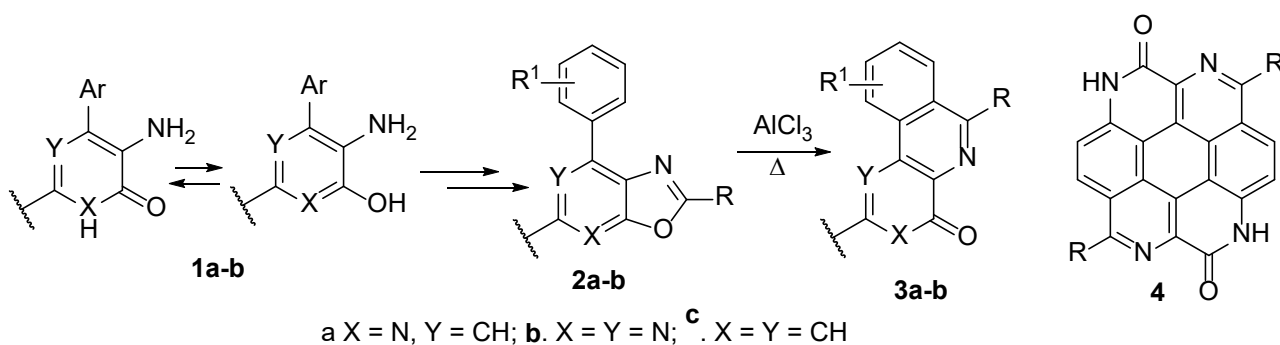
# НОВАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА 4-АРИЛБЕНЗ[*D*]ОКСАЗОЛОВ И ИХ АНАЛОГОВ

**Фисюк А.С.,<sup>a</sup> Шацаускас А.Л.,<sup>a</sup> Костюченко А.С.,<sup>b</sup> Шувалов В.Ю.<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> ФГБОУ ВО Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
644077, Омск, пр. Мира, 55а  
e-mail: fisyuk@chemotmsu.ru

<sup>b</sup> ФГБОУ ВО Омский государственный технический университет,  
644050, Омск, пр. Мира 11

Разработан новый способ получения 3-амино-4-арилпиридин-2(1H)-онов<sup>1</sup> **1a** (Y = C-H, X = N) и их аналогов **1b,c** (Y = X = CH; Y = X = N). Показано, что соединения **1a** являются эффективными люминофорами, обладают антиоксидантной активностью. Соединения **1a** были использованы в качестве люминесцентных красителей для иммуноферментного анализа<sup>2</sup>.



На основе 3-амино-4-арилпиридин-2(1H)-онов **1a-c** получены 4-арилбенз[*d*]оксазолы **2b**, 7-ариллоксазоло[5,4-*b*]пиридины **2a** и -пиримидины **2c**. Обнаружена новая перегруппировка соединений **2a-c**, протекающая при нагревании с AlCl<sub>3</sub>, сопровождающаяся расщеплением цикла оксазола и образованием конденсированной системы **3a-c**, содержащей пиридиновый цикл.<sup>3</sup> Эта перегруппировка была использована для синтеза ранее неизвестных производных тетраазакоронена **4**.

## Литература

- Shatsauskas A.L., Abramov A.A., Chernenko S.A., Kostyuchenko A.S., Fisyuk A.S. *Synthesis*, 2020, **52**, 227.
- Shatsauskas A., Shatalin Y., Shubina V., Zablodtskii Y., Chernenko S., Samsonenko A., Kostyuchenko A., Fisyuk A. *Dyes and Pigments*, 2021, **187**, 109072.
- Shatsauskas A.L., Mamonova T.E., Stasyuk A. J., Chernenko S.A., Slepukhin P.A., Kostyuchenko A.S., Fisyuk A. S. *J. Org. Chem.* 2020, **85**, 10072

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект No. 19-13-00273.



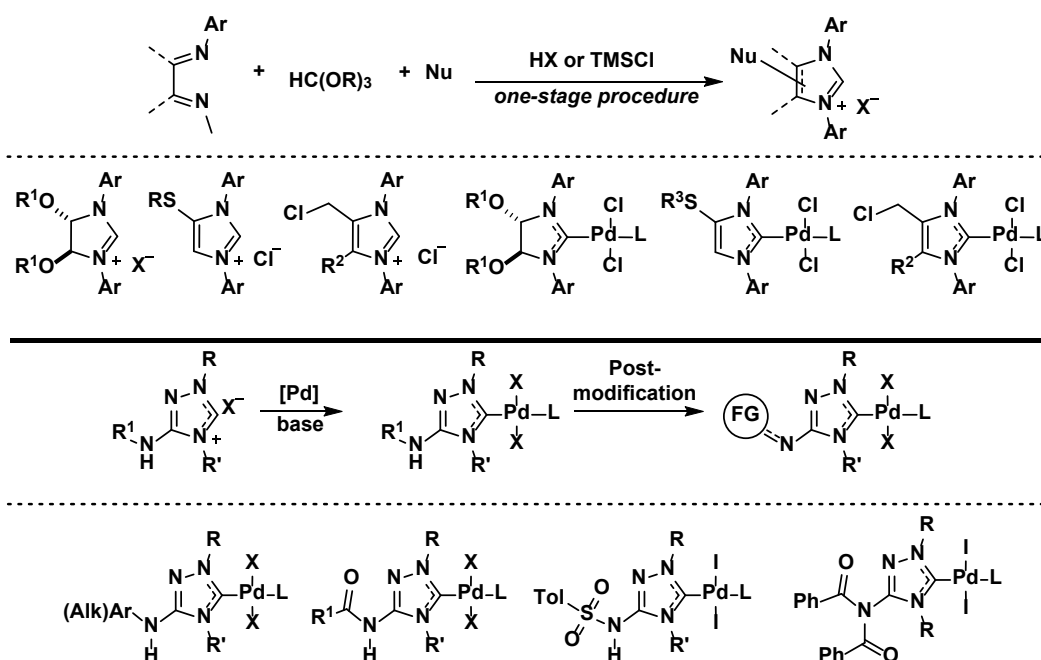
# НОВЫЕ СТРАТЕГИИ СИНТЕЗА ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ННС-ЛИГАНДОВ И КОМПЛЕКСОВ Pd/NHC

Чернышев В.М.,<sup>a</sup> Анаников В.П.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова,  
346428, Новочеркасск, ул. Просвещения 132,  
e-mail: chern13@yandex.ru

<sup>b</sup> Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47

N-гетероциклические карбены (NHC) и их комплексы с металлами широко используются в катализе, материаловедении и медико-биологических исследованиях.<sup>1,2</sup> В докладе обсуждаются новые стратегии синтеза гетероатом-функционализированных NHC-пролигандов и комплексов Pd/NHC, которые могут служить платформами для постмодификации лигандов и комплексов и обеспечивают повышенную стабильность катализаторов Pd/NHC.<sup>3,4</sup>



L = pyridine, lutidine, NHR'R'', etc.; R<sup>1</sup> = alkyl, aryl; R, R' = alkyl, aryl, X = Cl, Br, I

## Литература

1. Chernyshev V.M., Denisova E.A., Eremin D.B., Ananikov V.P. *Chem. Sci.*, 2020, **11**, 6957.
2. Chernyshev V.M., Khazipov O.V., Eremin D.B., Denisova E.A., Ananikov V.P. *Coord. Chem. Rev.*, 2021, **437**, 213860.
3. Pasyukov D.V., Chernenko A.Y., Shepelenko K.E., Kuttyrev V.V., Khrustalev V.N., Chernyshev V.M. *Mendeleev Commun.* 2021, **31**, 176.
4. Chernenko A.Y., Astakhov A.V., Kuttyrev V.V., Gordeev E.G., Burykina J., V., Minyaev M.E., Khrustalev V.N., Chernyshev V.M., Ananikov V.P. *Inorg. Chem. Front.* 2021, DOI: 10.1039/D1QI00453K.

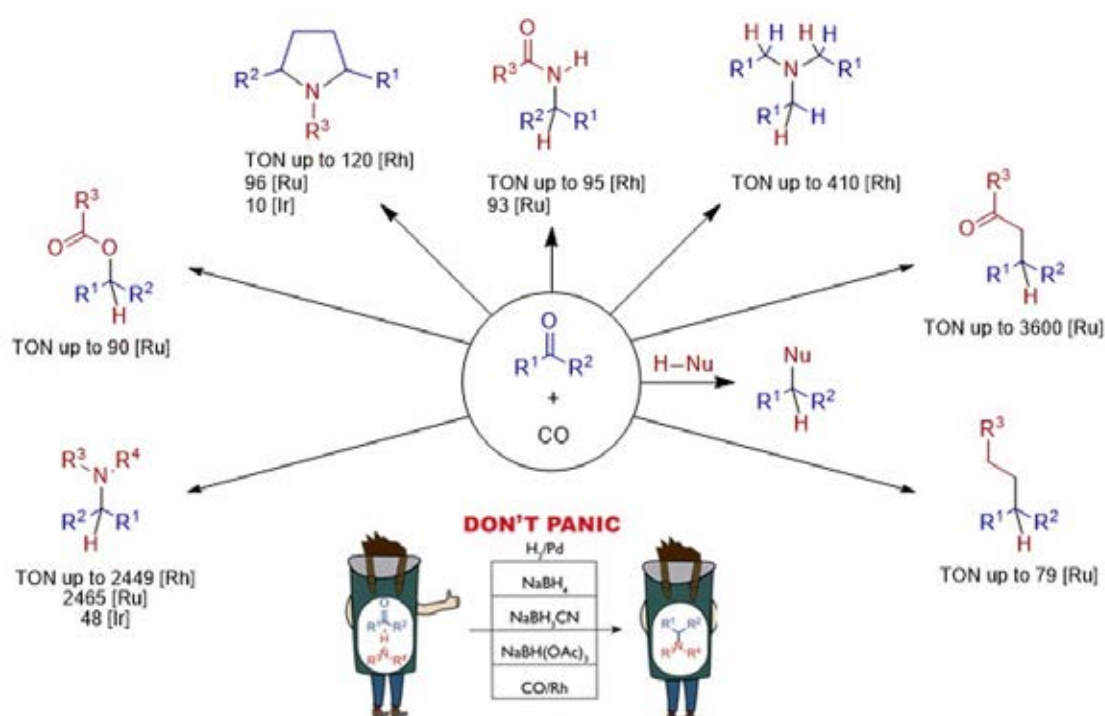
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-03-01053.

## ГИДРИРОВАНИЕ БЕЗ ВОДОРОДА?

**Чусов Д.А.,** Афанасьев О.И., Рунихина С.А., Подъячева Е.С., Цыганков А.А.,  
Бирюков К.О., Островский В.С., Фаткулин А.Р., Логинов Д.А.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской Академии Наук  
(ИНЭОС РАН), 119991, Москва, Вавилова 28,  
e-mail: chusov@ineos.ac.ru*

Проблемой многих восстановительных процессов является нежелательное гидрирование функциональных групп. Возможно ли проводить восстановление без гидрирования? В данном докладе представлены варианты восстановительного присоединения без внешнего источника водорода<sup>1-4</sup>. Используя данный подход было показано, что возможно восстановительное присоединение N-H, O-H и C-H нуклеофилов без внешнего источника водорода. Такие реакции были использованы в синтезе гетероциклов.



### Литература

1. E. Podyacheva, O.I. Afanasyev, A.A. Tsygankov, M. Makarova, D. Chusov *Synthesis*, 2019, **51**, 13, 2667.

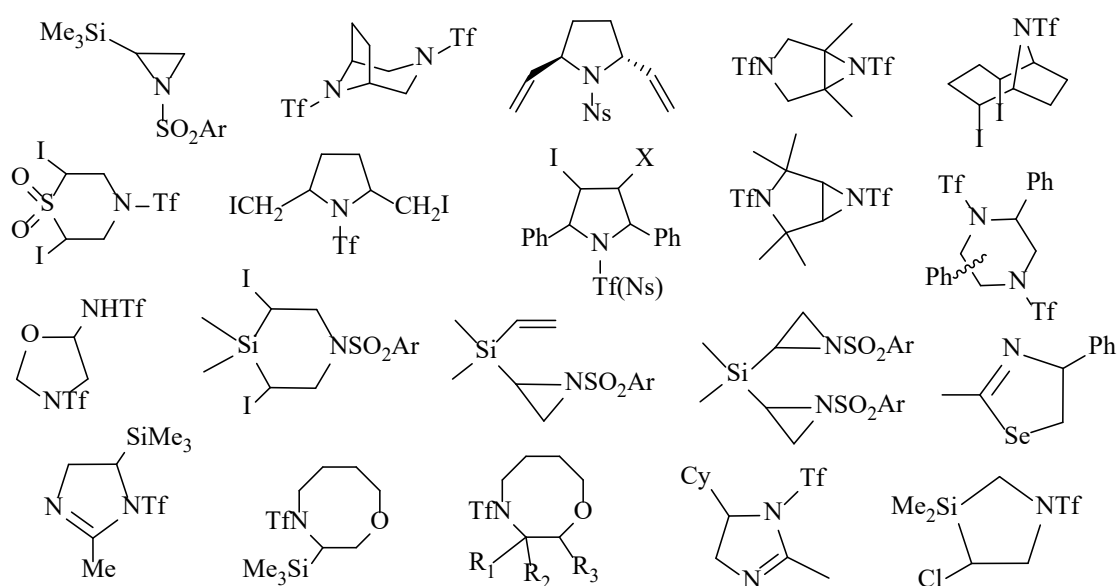
*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-20212.*

# ГЕТЕРОЦИКЛЫ НА ОСНОВЕ РЕАКЦИЙ ГАЛОГЕНАМИДИРОВАНИЯ

Шайнян Б.А.

Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской Академии Наук,  
664033, Иркутск, ул. Фаворского 1,  
e-mail: bagrat@iriioch.irk.ru

Сульфамидирование алкенов под действием различных окислителей представляет собой удобный путь к различным N-гетероциклам<sup>1</sup>. Неполный перечень синтезированных продуктов, содержащих в кольце, кроме атомов азота, атомы кислорода, серы, кремния, селена представлен на схеме<sup>2-6</sup>.



Многие продукты гетероциклизации образуются с выходами вплоть до количественных, что открывает путь к ранее труднодоступным гетероциклам. Конкурентное образование гетероциклических и линейных аддуктов зависит от природы реагента: фторированные и нефторированные сульфонамиды и карбоксамида ведут себя отлично друг от друга<sup>3-5</sup>. Природа окислителя и растворителя также принципиально меняет направление реакции.

## Литература

1. Moskalik M.Yu., Astakhova V.V., Shainyan B.A. *Pure and Applied Chemistry*, 2020, **92**, 123.
2. Astakhova V.V., Shainyan B.A., Moskalik M.Yu., Sterkhova I.V. *Tetrahedron*, 2019, **76**, 4531.
3. Astakhova V.V., Moskalik M.Yu., Shainyan B.A. *Org. Biomol. Chem.*, 2019, **17**, 7927.
4. Ganin A.S., Moskalik M.Yu., Astakhova V.V., Sterkhova I.V., Shainyan B.A. *Tetrahedron*, 2020, **76**, 131374.
5. Moskalik M.Yu., Garagan I.A., Astakhova V.V., Sterkhova I.V., Shainyan B.A. *Tetrahedron*, 2021, **88**, 132145.
6. Ushakova I.V., Shainyan B.A. *Mendeleev Commun.*, 2020, **30**, 794.

# ЖИЗНЕННО ВАЖНЫЕ ГЕТЕРОЦИКЛЫ НА ОСНОВЕ АЦЕТИЛЕНА: КОНЦЕПТУАЛЬНО НОВЫЕ СИНТЕЗЫ

[Шмидт Е.Ю.](#), Трофимов Б.А.

*Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук,  
664033, Иркутск, ул. Фаворского 1,  
e-mail: elenayuschmidt@mail.ru*

Обсуждаются каскадные мультикомпонентные синтезы гетероциклов с одновременным участием нескольких молекул ацетилена:

1. бициклических ацеталей, дигидропиранов из двух молекул ацетилена и кетонов,<sup>1</sup>
2. оксадиазинов из двух молекул ацетилена, кетонов и гидразина,<sup>2</sup>
3. N-аминоиндолов<sup>3</sup> и N-аминотиенопирролов<sup>4</sup> из двух молекул ацетилена, кетонов и гидразинов,
4. гетероциклических нитронов из двух молекул ацетилена, кетонов и гидроксилamina,<sup>5</sup>
5. N-аминопирролов из трех<sup>6</sup>/четырёх<sup>7</sup> молекул ацетилена и анилинов,
6. пирролоиндолов, пирролидинов и пиперидинов из трех молекул ацетилена, анилинов и воды.<sup>8</sup>

## Литература

1. Trofimov B.A., Schmidt E.Yu. *Acc. Chem. Res.*, 2018, **51**, 1117.
2. Schmidt E.Yu. et al. *Chem. Commun.*, 2019, **55**, 2632.
3. Schmidt E.Yu. et al. *Org. Lett.*, 2019, **21**, 4275.
4. Schmidt E.Yu. et al. *Eur. J. Org. Chem.*, 2021, 2802.
5. Schmidt E.Yu. et al. *J. Org. Chem.*, 2020, **85**, 6732.
6. Vitkovskaya N.M. *J. Org. Chem.*, 2020, **85**, 10617.
7. Schmidt E.Yu. et al. *Mendeleev Commun.*, 2020, **30**, 315.
8. Schmidt E.Yu. et al. *Org. Lett.*, 2021, **23**, 4743.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-13-00052).*

# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ КАРБОКСАМИДОВ ГЕТЕРОАРЕНАНТРАЦЕНДИОНОВ

Щекотихин А.Е., Литвинова В.А., Андреева Д.В., Тихомиров А.С.

ФГБНУ Научно-исследовательский институт по изысканию новых антибиотиков им. Г.Ф. Гаузе,  
119021, Москва, ул. Б.Пироговская, д.11  
e-mail: shchekotikhin@mail.ru

Линейные гетероаренантрацендионы обладают высоким потенциалом для разработки противоопухолевых средств. Производные этого ряда способны воздействовать на несколько мишеней, важных для опухолевого роста, таких как топоизомеразы 1 и 2 протеинкиназы, белки tNOX и Sirt1, а также стабилизировать G-квадруплексы нуклеиновых кислот<sup>1-3</sup>.

Показано, что производные 4,11-дигидрокси-5,10-диоксоантра[2,3-*b*]фуран-3-карбоксамиды, содержащие остатки циклических диаминов, в субмикромольных и микромольных концентрациях индуцируют апоптоз опухолевых клеток, включая резистентные сублинии с экспрессией трансмембранного транспортера р-гр и делецией гена опухолевого супрессора р53. Отобранное соединение лидер ЛХТА-2034 обладает высокой противоопухолевой активностью, включая модели резистентных опухолей *in vivo*<sup>4,5</sup>.

Для исследования связи структура-активность в ряду гетероаренантрацендионов синтезирована серия аналогов антрафуран-3-карбоксамиды ЛХТА-2034 с вариацией расположения карбоксамидной группы, структуры гетероциклического ядра, а также заместителей в *peri*-положениях хинонового фрагмента<sup>6-9</sup>. Показано, что положение карбоксамидной группы играет ключевую роль в способности гетероаренантрацендионов ингибировать пролиферацию солидных опухолевых клеток. Структура гетероциклического ядра критична для способности соединений генерировать активные формы кислорода и преодолевать множественную лекарственную устойчивость, связанную с экспрессией трансмембранного транспортера р-гр, а также оказывает существенное влияние на локализацию производных в опухолевых клетках.

## Литература

1. Tikhomirov A.S., Shtil A.A., Shchekotikhin A.E. *Recent Pat. Anticancer Drug Discov.*, 2018, **13**(2), 159.
2. Lin C.Y., et al. *Cancers*, 2019, **11**(3), 420.
3. Singh M., et al. *Biochimie*. 2021, **182**, 152.
4. Shchekotikhin A.E., et al. *Eur. J. Med. Chem.*, 2016, **112**, 114.
5. Shchekotikhin A.E., et al. *Pharmaceuticals*, 2020, **13**(5), 81.
6. Volodina Y.L. et al. *Eur. J. Med. Chem.*, 2019, **165**, 31.
7. Tikhomirov A.S., et al. *Eur. J. Med. Chem.*, 2018, **148**, 128.
8. Tikhomirov A.S., et al. *Eur. J. Med. Chem.*, 2020, **199**, 112294.
9. Volodina Y.L., et al. *Eur. J. Med. Chem.*, 2021, **221**, 113521.

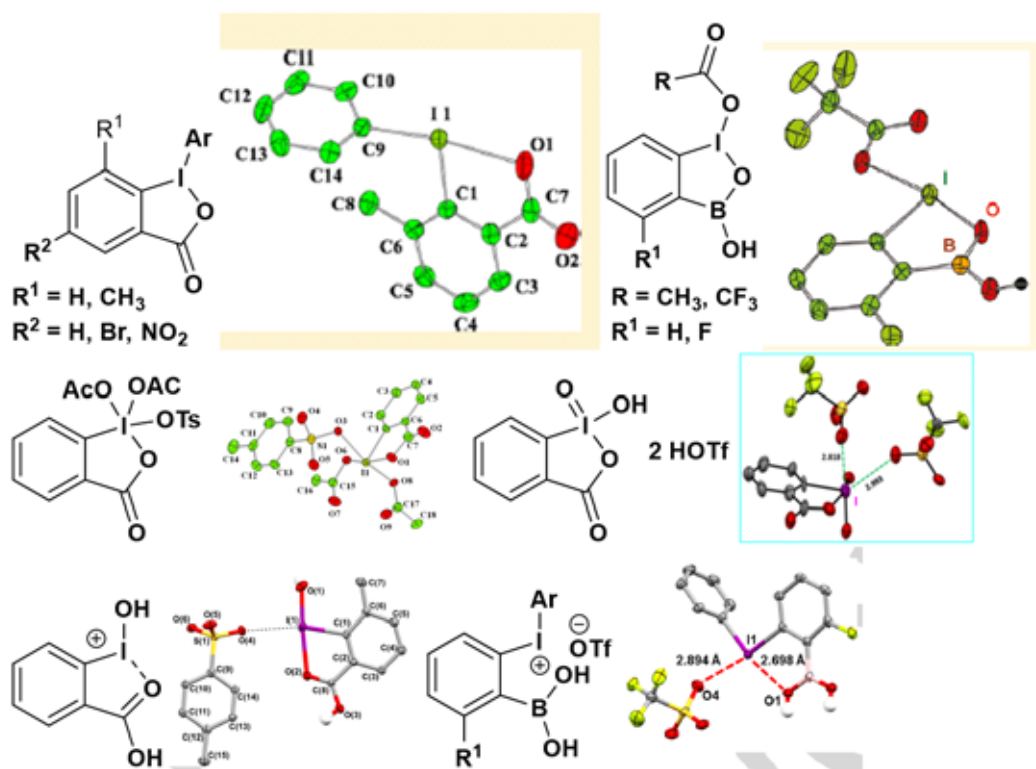
# ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ПОЛИВАЛЕНТНОГО ИОДА

**Юсубов М.С., Йошимура А., Постников П.С., Жданкин В.В.**

*Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий, Томский политехнический университет, 634050, Томск, проспект Ленина 30,  
e-mail: yusubov@tpu.ru*

Гетероциклические соединения поливалентного иода являются редким классом органическим веществ. В тоже время, они занимают ключевое место среди реагентов используемых в органическом синтезе в условиях metal-free трансформаций. Уникальность данных реагентов заключается в том, что они участвуют в окислительных процессах с образованием С-С- и С-Х-связей, где Х = О, N, S, Se, F, Cl, Br, I и т.д. [1].

Нами разработаны новые методы синтеза циклических и псевдоциклических соединений поливалентного иода. Исследованы их препаративные возможности в различных реакциях, в том числе в С-арилровании фенолов без участия металлов.



## Литература

1. Yoshimura A., Zhdankin V.V. *Chem. Rev.* 2016, 116, 3328–3435.
2. Yusubov M.S., Zhdankin V.V., *Mendeleev Commun.*, 2021, 31, 282–287
3. Irina S. Aliyarova I.S., Ivanov D.M., Soldatova N.S., Novikov A.S., Postnikov P.S., Yusubov M.S., Kukushkin V.Yu. *Cryst. Growth Des.* 2021, 21, 2, 1136–1147
4. Antonkin N., Vlasenko Y., Yoshimura A., Smirnov V., Borodina T., Zhdankin V., Yusubov M., Shafir A., Postnikov P. *JOC*, 2021, accepted
5. Yoshimura A., Huss C.D., Liebl M., Rohde G.T., Larson S.M., Frahm G.B., Luedtke M., Schumacher T.J., Gardner Z.S., Mereddy V.R., Zhdankin V.V., Yusubov M.S., Kitamura T., Saito A. *Adv. Syn. & Cat.*, 2021, accepted
6. Olshtrem A., Guselnikova O, Postnikov P., Trelin A., Yusubov M., Kalachyova Y., Lapcak L., Cieslar M., Ulbrich P., Svorcika V., Lyutakov O. *Nanoscale*, 2020, 12, 14581–14588

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-73-20031.*

# КАТИОННЫЕ АМФИФИЛЬНЫЕ ВЕЩЕСТВА НА ОСНОВЕ ТЕРПЕНОИДОВ В КАЧЕСТВЕ ПРОТИВОВИРУСНЫХ АГЕНТОВ

Яровая О.И.,<sup>a</sup> Соколова А.С.,<sup>a</sup> Чернышов В.В.,<sup>a</sup> Баранова Д.В.,<sup>a</sup>  
Щербаков Д.Н.,<sup>b</sup> Зарубаев В.В.,<sup>c</sup> Салахутдинов Н.Ф.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова СО РАН,  
630090, Россия, Новосибирск, просп. Лаврентьева, 9

<sup>b</sup> ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора

<sup>c</sup> Научно-исследовательский институт эпидемиологии и микробиологии им. Пастера,  
г. Санкт-Петербург  
e-mail: ooo@nioch.nsc.ru

Инфекционные заболевания представляют собой одну из основных проблем здравоохранения и, как следствие, приносят большой ущерб для национальной экономики и мировой экономики в целом. В последнее время самым распространенным словом на всех языках является пандемия или коронавирус. Политики, журналисты, люди всех профессий и даже пенсионеры рассуждают об этой болезни, ее причинах. Вирус SARS-CoV-2 является новым эмерджентным патогеном и многие вопросы, связанные с его изучением, остаются пока без ответа. В тоже время, с нами остались и другие вирусы, вызывающие разнообразные инфекционные заболевания. Поиск новых противовирусных агентов является одним из приоритетных направлений исследований в современной медицинской химии. Так, несмотря на десятилетия напряженной борьбы с применением как фармацевтических, так и нефармацевтических методов, каждый год сезонный грипп продолжает вызывать эпидемии по всему миру.

Нашим коллективом исследователей разработан новый класс противовирусных агентов на основе доступных монотерпенов, который можно отнести к катионным амфифильным веществам. Описанные нами соединения проявляют широкий спектр противовирусной активности. Так, нами обнаружены агенты, активные в отношении вирусов Эбола, Марбург, ортопокс вирусов, широкого спектра вирусов гриппа, вируса Хантаан, вируса Зика и вируса желтой лихорадки.

## Литература

1. Antivir. Res., 2015, v. 120, p. 126-133.
2. Europ. J. Med. Chem. 2017. V. 127. P. 661-670
3. Med. Chem. Commun., 2018, V. 9, N 12, Pp 2072-2082
4. Virology, V. 524, November 2018, Pp 69-77
5. Eur J.Org. Chem., 2021, V. 2021, N 3, Pp 452-463
6. BMC Lett., V. 40, 2021, 127926
7. Molecules 2021, 26(8), 2235
8. Eur. J. Med. Chem., 2020, V. 207, 112726

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-04-60038.*



# ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ С УЧАСТИЕМ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

[Яхваров Д.Г.](#)<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е.Арбузова  
Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»,  
420088, Казань, Арбузова 8

<sup>б</sup>Химический институт им. А.М.Бутлерова, Казанский Федеральный университет,  
420008, Казань, Кремлевская 29  
e-mail: [yakhvar@iopc.ru](mailto:yakhvar@iopc.ru)

Использование электрохимических методов в современной химии становится все более и более популярным в течение последних лет<sup>1</sup>. Основное внимание уделяется созданию новых энергосберегающих и экологически безопасных технологий получения практически значимых и востребованных химических соединений и новых материалов на их основе. В этом плане сочетание синтетических электрохимических методов и координационной химии является актуальным, так как это позволяет получать новые типы каталитических систем и осуществлять химические процессы, которые, в ряде случаев, недоступны при использовании обычных классических методов синтеза. Мягкие условия процесса, одностадийность, циклическая регенерация катализатора и использование недорогого и самого удобного вида энергии – электричества, являются основными достоинствами электрохимических методов.

В настоящей лекции рассматриваются разработанные при использовании электрохимических методов процессы генерирования и активации различных типов химических соединений, образованных гетероциклическими органическими производными: металлоорганических сигма-комплексов - активных катализаторов процессов гомо- и кросс-сочетания органических галогенидов, олигомеризации и полимеризации этилена<sup>2</sup>, фосфорорганических соединений<sup>3</sup>, а также магнито-активных комплексов<sup>4</sup> и наноразмерных катализаторов<sup>5</sup>.

## Литература

1. Gafurov Z.N., Kantyukov A.O., Kagilev A.A., Sinyashin O.G., Yakhvarov D.G. *Coord. Chem. Rev.*, 2021, **442**, 213986.
2. Yakhvarov D.G., Khusnuriyalova A.F., Sinyashin O.G. *Organometallics*, 2014, **33**, 4574.
3. Gafurov Z.N., Kagilev A.A., Kantyukov A.O., Sinyashin O.G., Yakhvarov D.G. *Coord. Chem. Rev.*, 2021, **438**, 213889.
4. Yakhvarov D., Trofimova E., Sinyashin O., Kataeva O., Lönnecke P., Hey-Hawkins E., Petr A., Krupskaya Yu., Kataev V., Klingeler R., Büchner B. *Inorg. Chem.*, 2011, **50**, 4553.
5. Khusnuriyalova A.F., Petr A., Gubaidullin A.T., Sukhov A.V., Morozov V.I., Büchner B., Kataev V., Sinyashin O.G., Yakhvarov D.G. *Electrochim. Acta.*, 2018, **260**, 324.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН, РФФ (проект 18-13-00442) и РФФИ (проект 19-33-90288).



# УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

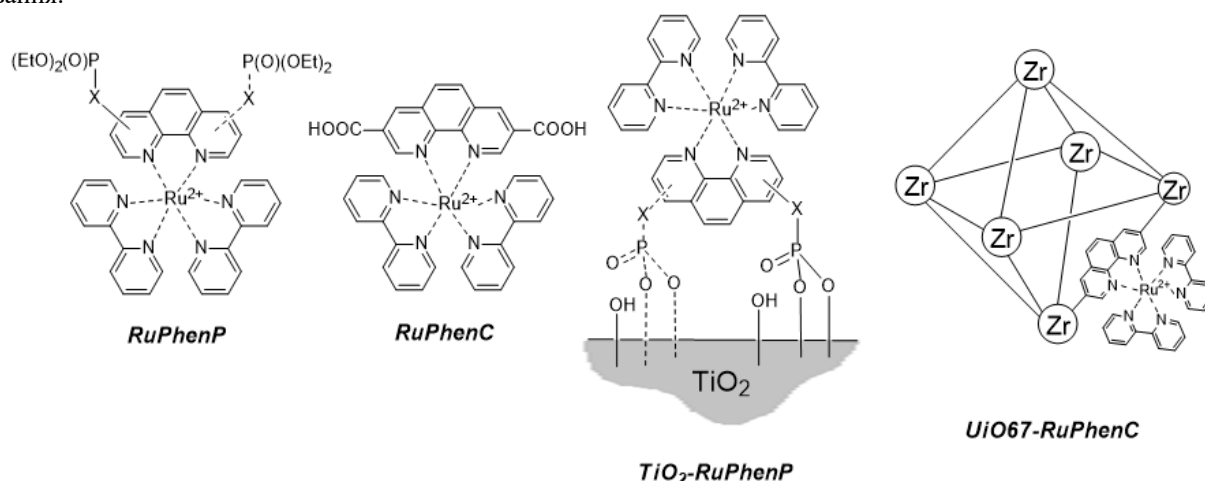
# РЕЦИКЛИЗУЕМЫЕ ФОТОРЕДОКС КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСОВ ПРОИЗВОДНЫХ 1,10-ФЕНАНТРОЛИНА

[Абель А.С.](#),<sup>a</sup> Морозков Г.В.,<sup>a</sup> Якушев А.А.,<sup>a</sup> Зеньков И.С.,<sup>a</sup>  
Аверин А.Д.,<sup>a</sup> Bessmertnykh-Lemeune A.G.,<sup>b</sup> Белецкая И.П.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,  
119991, Москва, Ленинские горы 1с3,

<sup>b</sup>École normale supérieure de Lyon, Laboratoire de Chimie, UMR 5182, Франция, Лион, 46 Allée d'Italie  
e-mail: antonabel@list.ru

Фоторедокс катализ с использованием видимого света (400-700 нм) активно применяется в современной органической химии, открывает новые возможности для проведения реакций с участием радикалов. Особое место среди фотокатализаторов занимают полипиридиновые комплексы рутения(II), проявляющие фотокаталитическую активность в большинстве реакций, но цена фотокатализаторов служит ограничивающим фактором этого направления. Решением этой проблемы является обеспечение возможности эффективного отделения фотокатализатора от реакционной смеси для повторного использования.



В докладе будут рассмотрены подходы к получению функционализированных комплексов Ru(II) с производными 1,10-фенантролина и созданию на их основе растворимых (**RuPhenP**, **RuPhenC**) и гетерогенизированных (**TiO<sub>2</sub>-RuPhenP**, **UiO67-RuPhenC**) рециклизуемых фотокатализаторов. Также будет рассмотрены возможности применения данных катализаторов в различных реакциях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект 20-73-00103) и РФФИ (проект 18-29-04030).

## ПРОИЗВОДНЫЕ ТИАЗОЛО[3,2-*a*]ПИРИМИДИНА В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

**Агарков А.С.**,<sup>a,б</sup> **Нефедова А.А.**,<sup>б</sup> **Габитова Э.Р.**,<sup>б</sup> **Исламов Д.Р.**,<sup>а</sup> **Овсянников А.С.**,<sup>а,б</sup>  
**Ширяев А.К.**,<sup>в</sup> **Соловьева С.Е.**<sup>а,б</sup>, **Антипин И.С.**<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова  
 ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, ул. Арбузова, д. 8.  
*e-mail: artem.agarkov.95.chem@mail.ru*

<sup>б</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
 420008, Казань, ул. Кремлевская, д. 29/1

<sup>в</sup>Самарский государственный технический университет,  
 443100, Самара, ул. Молодогвардейская, д.244

Конденсированные гетероциклические системы постоянно привлекают внимание химиков и фармакологов. К подобным структурам относятся тиазолпиримидины, которые являются перспективными для разработки лекарственных веществ.

Данная работа посвящена синтезу производных 2-арилгидразонов тиазоло[2,3-*a*]пиримидина и тиазоло[4,3-*a*]пиримидинов, а также оценке их цитотоксичности и выявлению зависимости цитотоксичность-структура полученных гетероциклических соединений. Производные тиазоло[4,3-*a*]пиримидинов были получены в условиях новой восстановительной системы (NaBH<sub>4</sub>/V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/EtOH).

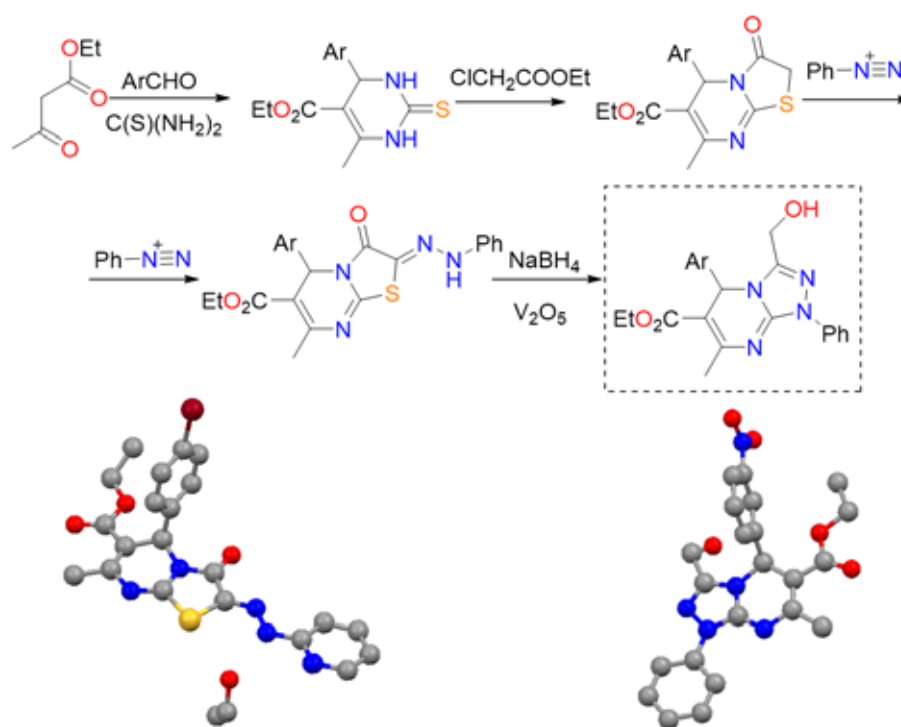


Рисунок 1. Кристаллическая структура производных 2-(арилгидразинилиден)[1,3]тиазоло [3,2-*a*]пиримидина и 3-(гидроксиметил)[1,2,4]тиазоло[4,3-*a*]пиримидина.

### Литература

1. Lashmanova E.A., Agarkov A.S. Chem. Heterocycl. Comp., **2019**, 55, 1217-1221

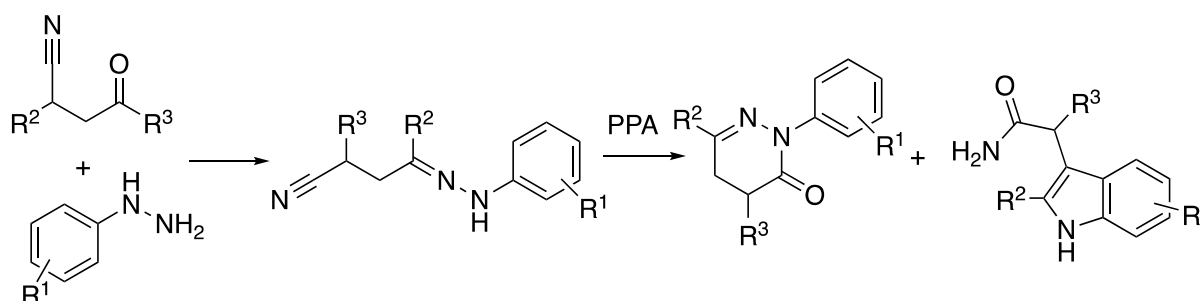
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-33-90124.

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОКСАЗОЛИНОВОЙ ЗАЩИТЫ, КАК НОВЫЙ ПОДХОД К ПОЛУЧЕНИЮ ИНДОЛИЛАЦЕТАМИДОВ С ВЫСОКОЙ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТЬЮ

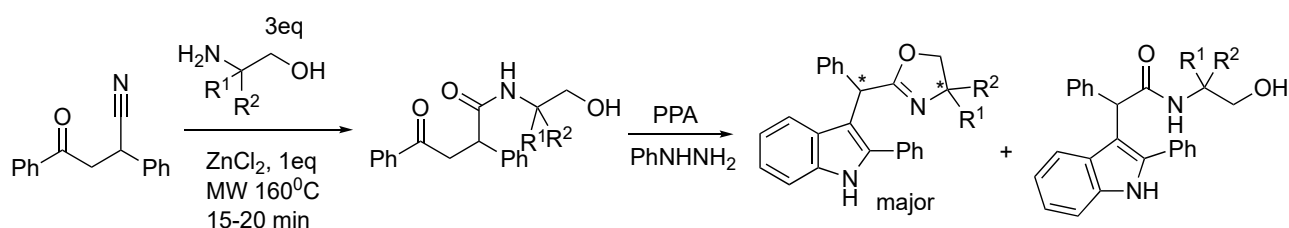
Аксенов Д.А., Аксенов Н.А., Аксенова И.В., Аксенов А.В., Притыко Л.А.

Северо-Кавказский федеральный университет, 355009, Россия, Ставрополь, ул. Пушкина, д. 1а.  
e-mail: mr.twos@mail.ru

Существует множество защитных групп для карбонильной-, amino-, гидрокси- групп, но практически не встречаются защитные группы для амидов. Нами ранее были синтезированы 2-арил-2-(3-индолил)ацетамиды, обладающие высокой противораковой активностью. Попытки реализовать реакцию Фишера с участием 4-оксо-бутанитрила, приводило к внутримолекулярной циклизации, с образованием пиридазин-она, как основного продукта.



Нами было предположено, что избежать внутримолекулярной циклизации, удастся, превратив нитрильную группу 4-оксо-2,4-дифенилбутанитрила в циклический аналог или превратив в замещенную амидную группу. Введение защитной группы на основе аминоэтанола позволило получить циклические аналоги индолилацетамидов.



Данная оксазолиновая защита имеет ряд преимуществ: она легко удаляется в кислой среде, может позволить улучшить фармакокинетику. Также немаловажным является наличие хирального центра и возможность разделение рацемической смеси.

«Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-00044, <https://rscf.ru/project/21-73-00044/>»

# ФОТОАКТИВИРУЕМЫЕ КРОСС-ДЕГИДРОГЕНАТИВНЫЕ С–N СОЧЕТАНИЯ ЦИКЛИЧЕСКИХ НИТРОНОВ С NH-СОДЕРЖАЩИМИ АЗОЛАМИ В ПРИСУТСТВИИ SELECTFLUOR®

**Акулов А.А.,<sup>а</sup> Вараксин М.В.,<sup>а,б</sup> Чарушин В.Н.,<sup>а,б</sup> Чупахин О.Н.<sup>а,б</sup>**

<sup>а</sup> Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19  
e-mail: a.a.akulov@urfu.ru

<sup>б</sup> Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,  
620990, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22

Циклические нитроны представляют класс соединений, выделяющихся не только за счет своих уникальных прикладных свойств, но и в силу многогранной реакционной способности. Ранее нами была опубликована серия работ, демонстрирующих предрасположенность модельных циклических нитронов, 2*H*-имидазол-1-оксидов, вступать в реакции кросс-сочетания с широким кругом органических субстратов, приводящие к образованию новых углерод–углеродных связей.

В настоящем исследовании<sup>1</sup> показано, что 2*H*-имидазол-1-оксиды **1** (Схема 1) способны подвергаться реакциям кросс-дегидрогенативного сочетания с рядом NH-содержащих азолов **2** в присутствии реагента Selectfluor®, в результате чего происходит образование новых связей С–N. При этом наблюдалось существенное увеличение выходов продуктов сочетания **3** в случае, если в качестве источника энергии использовалось видимое излучение в синем диапазоне длин волн.

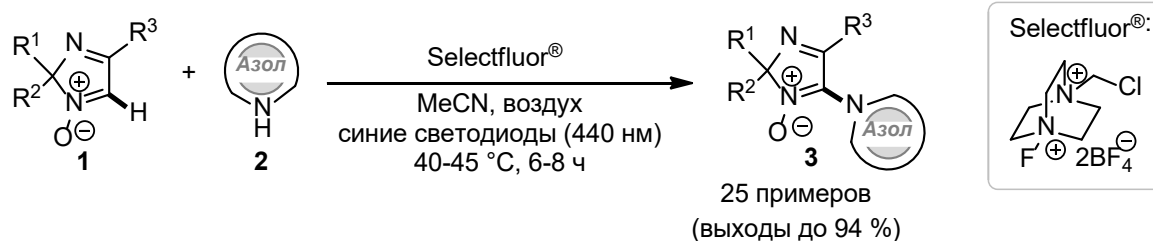


Схема 1. Кросс-дегидрогенативные сочетания 2*H*-имидазол-1-оксидов с NH-азолами.

Стоит отметить, что изучение механизма сочетания позволило установить его свободнорадикальную природу. В настоящее время продолжается активная работа по расширению границ применимости разработанного синтетического подхода.

#### Литература

1. Akulov A.A., Varaksin M.V., Tsmokalyuk A.N., Charushin V.N., Chupakhin O.N. *Green Chem.*, 2021, **23**, 2049.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-43-01004.*



# ПРОСТОЙ СИНТЕЗ МОНОФТОРИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРРОЛОВ ИЗ $\beta$ -ФТОР- $\beta$ -НИТРОСТИРОЛОВ

[Алдошин А.С.](#),<sup>a</sup> Таболин А.А.,<sup>b</sup> Иоффе С.Л.,<sup>b</sup> Ненайденко В.Г.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинский горы 1с3, e-mail: alexander.aldoshin@gmail.com*

<sup>b</sup> *Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47*

Пиррольное кольцо является составной частью многих природных и фармацевтически активных соединений. Пиррол и его производные широко используются в качестве промежуточных продуктов в синтезе фармацевтических препаратов, агрохимикатов, красителей и других ценных органических соединений<sup>1</sup>. Включение фтора в молекулу может положительно влиять на ряд важных фармакокинетических и физико-химических свойств лекарственных средств<sup>2-3</sup>. Разработка новых путей к фторсодержащим производным пиррола представляет большой исследовательский интерес<sup>4</sup>.

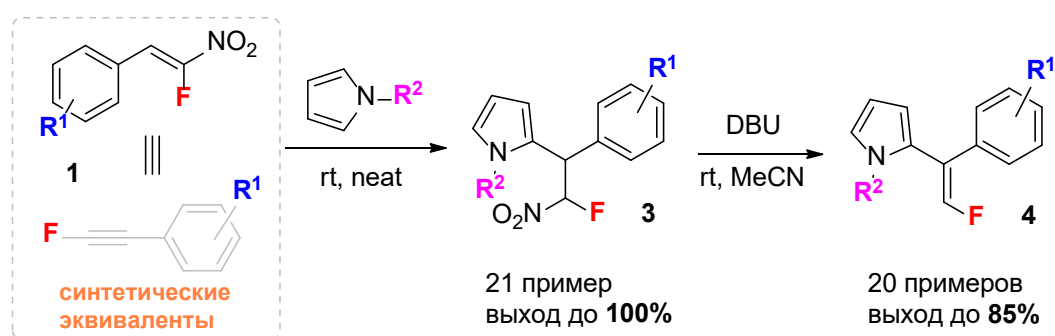


Схема 1. Получение новых фторсодержащих производных пиррола

Данная работа посвящена получению новых классов монофторированных производных пиррола. Исследовано сопряженное присоединение по Михаэлю пирролов к  $\beta$ -фтор- $\beta$ -нитростиролам без использования катализатора (Схема 1). Было обнаружено, что реакция протекает без растворителя с образованием 2-(2-фтор-2-нитро-1-арилэтил)-1H-пирролов<sup>3</sup>. Эффективность данного подхода была продемонстрирована на широком спектре  $\beta$ -фтор- $\beta$ -нитростиролов с высокими выходами целевых продуктов. В свою очередь, аддукты **3** оказались эффективными прекурсорами для синтеза новых 2-(2-фтор-1-арилвинил)-1H-пирролов **4** путем отщепления азотистой кислоты под действием основания (Схема 1). Описанный нами подход является незаменимой альтернативой прямому присоединению пирролов к неувеличиваемым и нестабильным 1-фторацетиленам.

## Литература

- Gholap S.S. *Eur. J. Med. Chem.*, 2016, **110**, 13–31.
- Wang B.C.; Wang L.J.; Jiang B.; Wang S.Y.; Wu N.; Li X.Q.; Shi D.Y. *Mini Rev. Med. Chem.*, 2017, **17**, 683–692.
- Gillis E.P.; Eastman K.J.; Hill M.D.; Donnelly D.J.; Meanwell N.A. *J. Med. Chem.*, 2015, **58**, 8315–8359.
- Serdyuk O.V.; Muzalevskiy V.M.; Nenajdenko V.G. *Synthesis*, 2012, **44**, 2115–2137.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-33-70132.

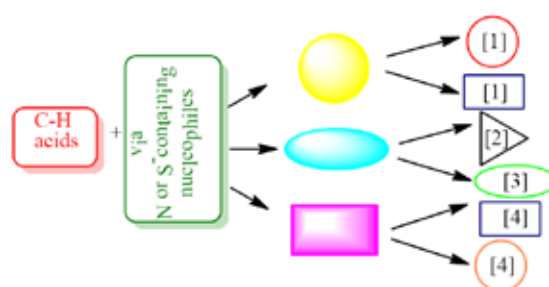


# DOS СТРАТЕГИЯ ДРАГ-ДИЗАЙНА НА ОСНОВЕ ДИКАРБОНИЛЬНЫХ И АРОМАТИЧЕСКИХ СН-КИСЛОТ

Ахметова В.Р., Ахмадиев Н.С., Бикбулатова Э.М.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,  
 450077, Уфа, проспект Октября 141,  
 e-mail: vnirara@mail.ru

Диверсифицированно-ориентированный синтез (DOS) – это стратегия синтеза органических молекул в концепции многовекторного моделирования базовых структур с целью создания библиотеки структурно или стереохимически разнообразных молекул для оценки их биоактивности.



Наше внимание сфокусировано на СН-кислотные базисные субстраты, в которых моделируются гетероциклические системы, обнаруженные в натуральных продуктах или молекулах лекарственных средств.

## I. Дикарбонильные СН-кислоты

1,3-Дикарбонильные соединения (дикетоны, ацетоуксусный эфир, малондинитрил) изучены в реакциях гетероциклизации путем МКР с альдегидами, S- и N-нуклеофилами. ДОС-методология в зависимости от природы субстратов и реагентов дает биоактивные сульфанил замещенные пиразолы, оксазолы, пиразолоны, пиридины или тиакраунэфиры <sup>1-3</sup>.

## II. Ароматические СН-кислоты

Фенольные соединения подвергаются amino- и тиометилированию по C<sub>sp<sup>2</sup></sub>-H реакционным центрам с образованием O,N- или O,S-полидентантных лигандов <sup>4</sup>, примененных в дизайне металла- гетероциклических систем, фрагментарно сходных с металлоферментами, которые проявляют фармакологические свойства.

## Литература

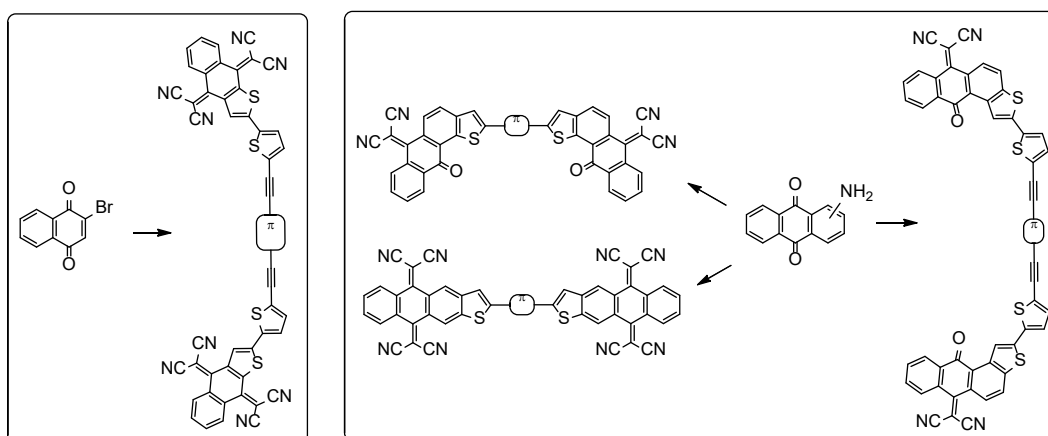
1. Akhmetova V.R., Akhmadiev N.S., Abdullin M.F., Dzhemileva L.U., D'yakonov V.A. *RSC Adv.*, 2020, **10**, 15116-15123.
2. Akhmadiev N.S., Mescheryakova E.S., Khairullina V.R., Akhmetova V.R., Ibragimov A.G. *Chem. Heterocycl. Comp.* 2020, **56**(4), 473–481.
3. Akhmadiev N.S., Mescheryakova E.S., Akhmetova V.R., Khairullina V.R., Khalilov L.M., Ibragimov A.G. *J. of Mol. Struct.* 2021, **1228**, 129734.
4. Akhmetova V.R., Bikbulatova E.M., Mescheryakova E.S., Akhmadiev N.S., Abdullin M.F., Ibragimov A.G. *Polyhedron* 2020, **187**, 114678.

# СИНТЕЗ АКЦЕПТОРНЫХ МОЛЕКУЛ НА ОСНОВЕ НАФТО- И АНТРАТИОФЕНОВЫХ КАРКАСОВ

**Баранов Д.С., Попов А.А., Дмитриев А.А., Кобелева Е.С.**

*Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН,  
630090, г Новосибирск, ул. Институтская, 3,  
e-mail: baranov@kinetics.nsc.ru*

Материалы на основе тиофен-конденсированных аценоподобных систем являются наиболее перспективными органическими полупроводниками<sup>1</sup>.



Нами разработаны простые протоколы для синтеза новой группы  $\pi$ -сопряженных акцепторных молекул на основе нафто- и антрадиофеновых каркасов разного строения, содержащих дигианометиленовые заместители<sup>2-5</sup>. Процедуры предусматривают превращение в несколько стадий коммерчески доступных 2-бромнафтохинона и аминокантрахинонов в соответствующие целевые молекулы. Главную роль в цепочке превращений играет этап аннелирования тиофеновых колец к хиноновым ядрам, который осуществляется разными способами.

## Литература

1. He D., Zhao F., Jiang L., Wang C. *Journal of Materials Chemistry A*, 2018, **6**, 8839.
2. Shatrova A.A., Baranov D.S., Uvarov M.N., Kazantsev M.S., Glebov E.M., Fadeev D.S. Kulik L.V. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 2017, **231**, 425.
3. Baranov D.S., Uvarov M.N., Kazantsev M.S., Glebov E.M., Nevostruev D.A., Mostovich E.A., Antonova O.V., Kulik L.V. *European Journal of Organic Chemistry*, 2018, 2259.
4. Baranov D.S., Krivenko O.L., Kazantsev M.S., Nevostruev D.A., Kobleva E.S., Zinoviev V.A., Dmitriev A.A., Gritsan N.P., Kulik L.V. *Synthetic Metals*, 2019, **255**, 116097.
5. Baranov D.S., Nevostruev D.A., Kazantsev M.S., Zinoviev V.A., Zelentsova E.A., Dmitriev A.A., Gritsan N.P., Tsentlovich Y.P., Kotova M., Düreth J., Sperlich A., Dyakonov V, Kulik L.V. *ChemistrySelect* 2021, **6**, 6043-6049.

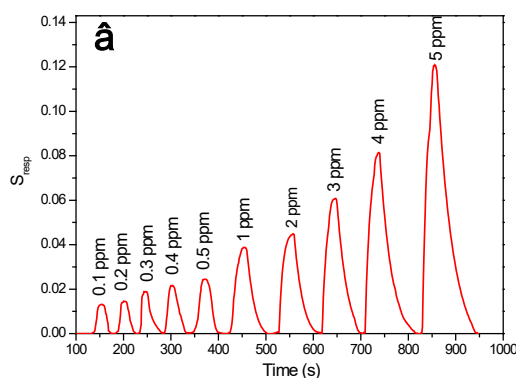
*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-33-70126.*

# ГИБРИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ФТАЛОЦИАНИНОВ МЕТАЛЛОВ КАК АКТИВНЫЕ СЛОИ ХИМИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ

[Басова Т.В.](#)

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского Отделения Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, проспект академика Лаврентьева 3,  
e-mail: basova@niic.nsc.ru*

Развитие новых методов и поиск новых материалов для создания активных слоев сенсоров для определения токсичных веществ в воде и воздухе является актуальной задачей. Гибридные материалы на основе фталоцианинов металлов с углеродными нанотрубками и наночастицами благородных металлов находят широкое применение в качестве активных слоев различных сенсорных устройств [1-3].



В данной работе представлен обзор результатов, полученных нашей научной группой, по использованию слоев гибридных материалов на основе фталоцианинов металлов с углеродными нанотрубками (SWCNT) и наночастицами металлов в качестве активных слоев адсорбционно-резистивных сенсоров для определения различных газов. В ходе исследований изучено влияния природы заместителей во фталоцианиновом кольце и методов получения гибридных материалов на сенсорные свойства получаемых слоев.

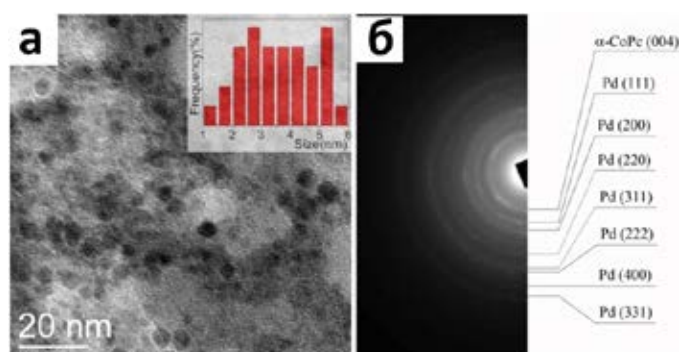


Рисунок 1. Изображение, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии (а), и дифракционная картина (б) пленки CoPc/Pd. Типичный адсорбционно-резистивный сенсорные отклик пленки CoPc (в).

## Литература

1. Basova T.V., Polyakov M.S. *Macroheterocycles*, 2020, **30**, 91.
2. Polyakov M., Ivanova V., Klyamer D., Köksoy B., Şenocak A., Demirbaş E., Durmuş M., Basova T. *Molecules* 2020, **25**, 2073.
3. Basova T., Ray A. *ECS J. Solid State Sci. Technol.* 2020, **9**, 061001.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-73-10142.

# СИНТЕЗ, ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕЗОИОННЫХ (ТИЕНО[3,4-D]-1,2,3-ТРИАЗОЛИЙ-4-ИЛИДЕН)-ЭТАН-1-ОЛАТОВ

**Бельская Н.П.**,<sup>а</sup> Елтышев А.К.,<sup>а</sup> Чернышева Н.В.,<sup>а</sup> Бенасси Э.,<sup>б</sup> Минин А.С.,<sup>в</sup>  
Поздина В.А.,<sup>г</sup> Слепухин П.А.<sup>д</sup>

<sup>а</sup>Уральский федеральный университет, 620002, Екатеринбург, Мира 19,  
e-mail: n.p.belskaya@urfu.ru

<sup>б</sup>Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

<sup>в</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева, УрО РАН,  
620108, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

<sup>г</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского, УрО РАН,  
620219, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22

<sup>д</sup>Институт иммунологии и физиологии, УрО РАН,  
620049, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 20

Мы синтезировали и охарактеризовали новое семейство мезоионных бициклических конденсированных гетероциклов<sup>1</sup>. Усовершенствованный подход позволил получить серию новых 1-(2-арил-4Н-тиено[3,4-d]-1,2,3-триазол-2-ий-4-илиден)-этан-1-олатов и обеспечил большое разнообразие структур за счет введения заместителей с различными характеристиками и их комбинаций, введения гетероциклических фрагментов и изменения количества ароматических колец. Комплексные спектральные, теоретические и биологические исследования выявили особенности фотофизических и биологических свойств этих соединений.

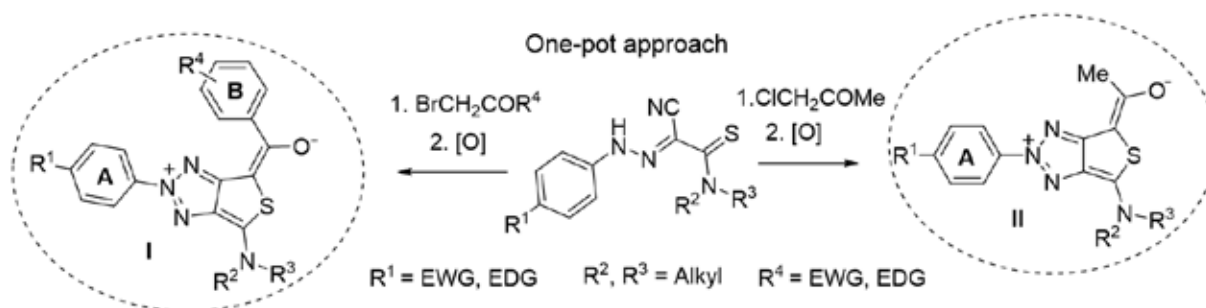


Схема 1. Синтез 1-(2-арил-4Н-тиено[3,4-d]-1,2,3-триазол-2-ий-4-илиден)-этан-1-олатов

## Литература

1. Бельская Н.П., Кокшаров А.В. Елисеева А.И., Фан Дж., Бакулев В.А. *Химия гетероцикл. соединений*, 2011, 47, 564.

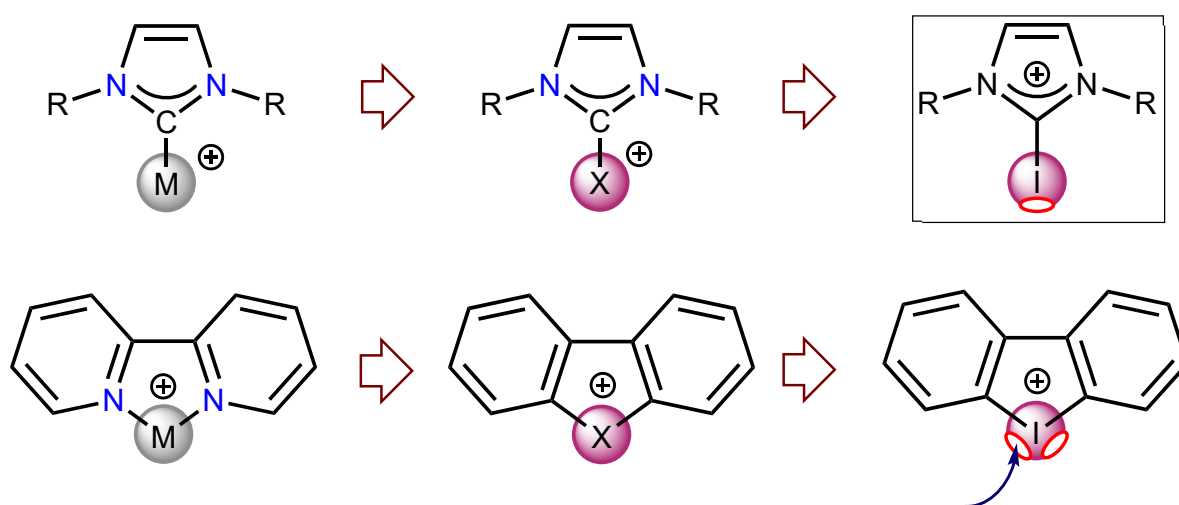
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-13-00084. Авторы благодарят Сибирский суперкомпьютерный центр СО РАН.

# ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ДОНОРЫ ГАЛОГЕННЫХ СВЯЗЕЙ КАК ОРГАНИЧЕСКИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ

Болотин Д.С.

*Институт химии Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект 26.  
e-mail: d.s.bolotin@spbu.ru*

В течение последнего десятилетия был достигнут огромный прогресс в области изучения органокатализаторов. В то время как нековалентный катализ с участием водородных связей на сегодняшний день хорошо изучен, исследования в области гомогенного органокатализа с участием галогенных связей находятся на начальной стадии своего развития и работы в этом направлении имеют высокую актуальность.



**Sigma-hole as a coordination site**

**Рисунок 1.** Сравнение металлокомплексных катализаторов и органических катализаторов — доноров галогенных связей.

В докладе будут обсуждаться современные тенденции в области создания органокатализаторов на основе галогенных связей и будут показаны их сходства и различия с традиционными металлокомплексными катализаторами. В частности, будут обсуждаться перспективы создания нейтрально заряженных<sup>1</sup> и катионных катализаторов на основе иода(I)<sup>2</sup> и иода(III)<sup>3</sup>.

## Литература

1. Yunusova S.N., Bolotin D.S., Vovk M.A., Tolstoy P.M., Kukushkin V.Y., *Eur. J. Org. Chem.*, 2020, 6763.
2. Sysoeva A.A., Novikov A.S., Il'in M.V., Suslonov V.V., Bolotin D.S., *submitted*.
3. Yunusova S.N., Novikov A.S., Soldatova N.S., Vovk M.A., Bolotin D.S., *RSC Adv.*, 2021, **11**, 4574.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-73-10013.*

# РАЗВЕТВЛЕННЫЕ ОЛИГОАРИЛЕНСИЛАНЫ С ЭФФЕКТИВНЫМ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫМ ПЕРЕНОСОМ ЭНЕРГИИ

**[Борщев О.В.](#), Скоротецкий М.С., Сурин Н.М., Заборин Е.А., Пономаренко С.А.**

*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии Наук, 117393, Москва, ул. Профсоюзная, 70,  
e-mail: borshchev@ispm.ru*

В работе представлен новый подход к созданию эффективных люминофоров за счет соединения двух типов различных хромофоров через атом кремния, благодаря чему разрывается сопряжение между ними и происходит их фиксация в пространстве на расстоянии 1-2 нм, необходимом для эффективного переноса энергии по механизму Ферстера<sup>1,2</sup>. Изучение спектрально-люминесцентных свойств синтезированных молекул позволило выявить влияние их химического строения и параметров молекулярной структуры (общего количества люминофоров в макромолекуле, те или иные комбинации различных люминесцентных фрагментов в структуре макромолекулы) на оптические, и прежде всего люминесцентные характеристики таких систем<sup>3</sup>.

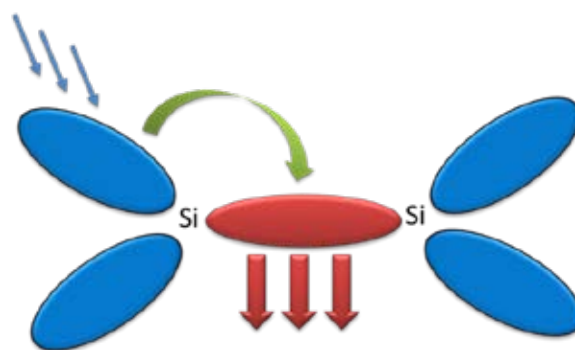


Рисунок 1. Схема внутримолекулярного переноса энергии.

Синтезированные КНЛ могут использоваться в высокоэффективных пластмассовых сцинтилляторах, сцинтилляционных волокнах с коротким временем высвечивания, различных устройствах в качестве сместителей спектра, в качестве люминесцентных сшивающих агентов для функциональных органосилоксановых полимеров.

## Литература

1. S.A. Ponomarenko et al. Scientific Reports 2014, **4**, 6549.
2. Yu.N. Luponosov et al., Chem. Mater. 2009, **21**, 447.
3. O.V. Borshchev et al., Organic Photonics and Photovoltaics, 2017, **5** (1), 1-8.
4. O.V. Borshchev et al., INEOS OPEN, 2019, **2** (4), 112-123.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №18-29-17006 мк.*

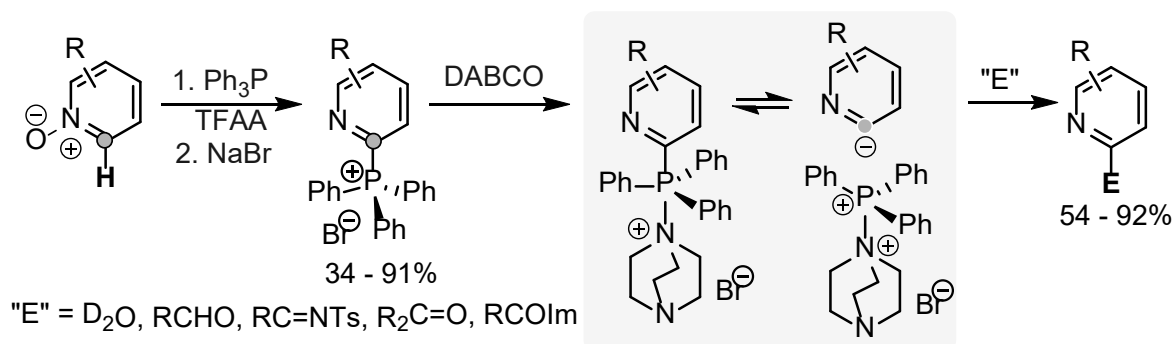
## НОВАЯ «UMPOLUNG»-СТРАТЕГИЯ C2-ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ ПИРИДИНОВОГО КОЛЬЦА

Бугаенко Д.И., Карчава А.В.

*Химический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова  
 119991, Москва, Ленинские горы 1/3,  
 e-mail: bugaenko@org.chem.msu.ru*

Замещенные по положению 2 пиридины широко используются в качестве лекарственных препаратов и лигандов для гомогенного катализа. В силу электронодефицитной природы пиридинового кольца, традиционный подход к функционализации положения 2 основан на реакциях нуклеофильных реагентов с 2-галопиридинами или *N*-оксидами пиридинов. Альтернативный подход, основанный на применении реакции 2-пиридилнуклеофильных реагентов с электрофилами, используется в значительной степени реже. Этот подход связан с применением 2-пиридиллитиевых и -магниевых соединений, которые обладают низкой стабильностью в силу дестабилизирующего влияния неподеленной электронной пары атома азота.

Реакции пиридин-*N*-оксидов с  $\text{Ph}_3\text{P}$  в разработанных нами условиях обеспечивают региоселективный подход к синтезу (пиридин-2-ил)фосфониевых солей. При активации DABCO эти соли служат синтетическими эквивалентами функционализированных 2-пиридиланионов в реакциях с электрофильными реагентами.



Новая "umpolung"-стратегия позволяет провести C2-функционализацию пиридинового кольца электрофильными реагентами, не прибегая к использованию нестабильных металлоорганических реагентов. Реакции (пиридин-2-ил)фосфониевых солей осуществимы с высокой эффективностью без применения низких температур и для субстратов, содержащих циано, нитро, карбонильные группы, а также атомы галогена и СН-кислотные алкильные заместители, несовместимые с металлоорганическими реагентами.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-03-00456.*



# ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ И ТРАНСФОРМАЦИЯМ ПОЛИФТОРФЛАВОНОВ

**Бургарт Я.В., Щербаков К.В., Артемьева М.В., Салоутин В.И.**

*Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского  
Уральского отделения Российской Академии Наук,  
620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской 22 / Академическая 20  
e-mail: burgart@ios.uran.ru*

В докладе рассматриваются различные аспекты химии полифторфлавонов, перспективных для создания биоактивных соединений. Обсуждаются подходы к синтезу флавонов, содержащих атомы фтора в различных структурных фрагментах (схема 1), и особенности их реакций с аминокислотами, биогенными аминами и гетероциклическими аминами. Некоторые примеры этих превращений приведены на схеме 2. Среди синтезированных производных обнаружены соединения с высоким антимикробным и противовирусным действием.

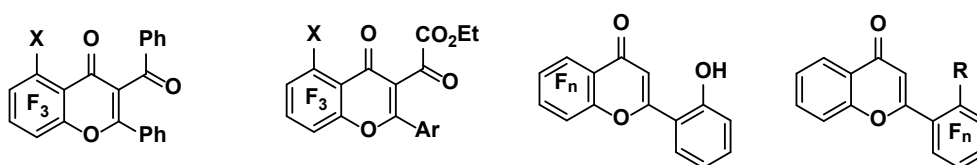


Схема 1. Структуры синтезированных фторсодержащих флавонов

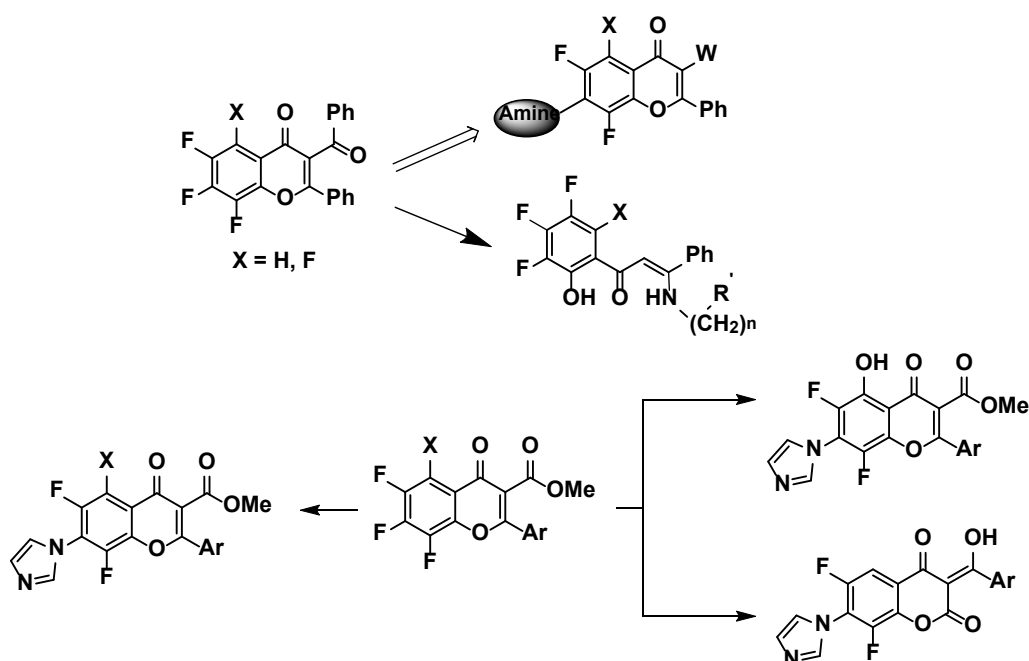


Схема 2. Направления реакций 3-замещенных полифторфлавонов с аминами

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Министерства промышленности и науки Свердловской области (проект № 20-43-660011).

# НОВЫЙ ПОДХОД ДЛЯ АНАЛИЗА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЕЙ И СЛОЖНЫХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДОМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

**Бурыкина Ю.В., Анаников В.П.**

*Институт Органической Химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47,  
e-mail: ivanova@ioc.ac.ru*

Изучение каталитических систем для синтеза соединений со связью С-С и С-S на сегодняшний день является одним из наиболее динамично развивающихся направлений органической химии.<sup>1</sup> Исследование механизма химических процессов занимает значительную часть работы, однако, несмотря на наличие различных физико-химических методов анализа, возникают сложности при изучении процессов *in situ*.

Масс-спектрометрия высокого разрешения на сегодняшний день занимает одну из лидирующих позиций среди современных аналитических методов. Благодаря своей высокой чувствительности, скорости анализа и информативности такой подход широко используется в химии, биологии и материаловедении.<sup>2</sup> Подходы для анализа различных классов соединений постоянно совершенствуются.<sup>3</sup> Использование последовательного отбора проб из системы позволяет анализировать широкий круг интермедиатов, наблюдать конверсию исходных соединений, образование продуктов реакции и побочных веществ. При проведении прямого непрерывного детектирования из реакционной смеси в режиме реального времени возможно наблюдать поведение ключевых компонентов реакции.<sup>4,5</sup>

Отдельно следует отметить использование масс-спектрометрии для изучения фотохимических реакций.<sup>6</sup> Непрерывное возбуждение смеси непосредственно в ионизационной камере масс-спектрометра позволяет зафиксировать целевые и побочные продукты реакции.<sup>1</sup>

## Литература

1. Burykina J.V., Shlapakov N.S., Gordeev E.G., Koenig B., Ananikov V.P., *Chem. Sci.*, 2020, **11**, 10061.
2. Burykina J.V., Boyko D.A., Ilyushenkova V.V., Eremin D.B., Ananikov V.P., *Dokl. Phys. Chem.*, 2020, **492**, 51.
3. Eremin D.B., Boyko D.A., Kostyukovich A.Yu., Burykina J.V., Denisova E.A., Anania M., Martens J., Berden G., Oomens J., Roithová J., Ananikov V.P., *Chem. Eur. J.*, 2020, **26**, 67, 15672.
4. Galushko A.S., Prima D.O., Burykina J.V., Ananikov V.P., *Inorg. Chem. Front.*, 2021, **8**, 3, 620.
5. Kostyukovich A.Yu., Burykina J.V., Eremin D.B., Ananikov V.P., *Inorg. Chem.*, 2021, **60**, 10, 7128.
6. Zalesskiy S.S., Shlapakov N.S., Ananikov V.P., *Chem. Sci.*, 2016, **7**, 6740.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 21-13-00193.*

# С(sp<sup>2</sup>)-Н ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ В НЕАРОМАТИЧЕСКИХ АЗАГЕТЕРОЦИКЛАХ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ И МЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ

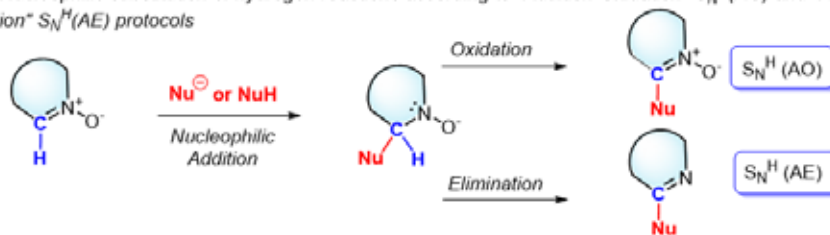
**Вараксин М.В.,<sup>а,б</sup> Смышляева Л.А.,<sup>а,б</sup> Мосеев Т.Д.,<sup>а</sup> Акулов А.А.,<sup>а</sup>  
Чарушин В.Н.,<sup>а,б</sup> Чупахин О.Н.<sup>а,б</sup>**

<sup>а</sup> Уральский федеральный университет, 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19  
e-mail: m.v.varaksin@urfu.ru

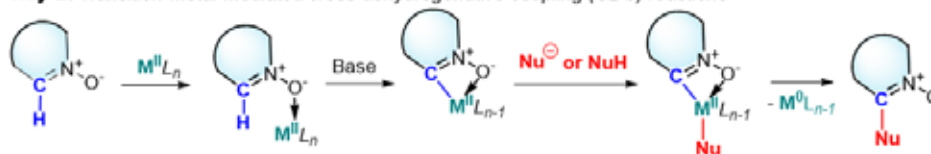
<sup>б</sup> Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,  
620990, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22

Методология С(sp<sup>2</sup>)-Н функционализации является одним из наиболее эффективных синтетических инструментов в химии азагетероциклических соединений. Данные превращения могут быть применены для модификации неароматических азагетероциклических N-оксидов путем построения С-С и С-Н связей при использовании следующих синтетических подходов: реакции нуклеофильного замещения водорода S<sub>N</sub><sup>H</sup> (Путь А), металл-катализируемого дегидрогенативного сочетания (Путь В), а также радикал-индуцированного дегидрогенативного сочетания (CDC) [1-4].

**Way A:** Nucleophilic substitution of hydrogen reactions according to "Addition-Oxidation" S<sub>N</sub><sup>H</sup>(AO) and "Additive Elimination" S<sub>N</sub><sup>H</sup>(AE) protocols

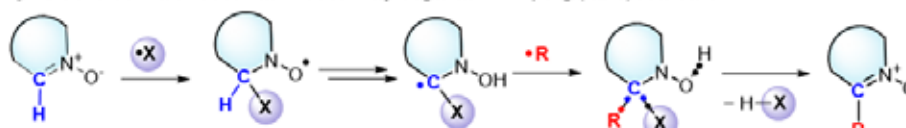


**Way B:** Transition metal-mediated cross-dehydrogenative coupling (CDC) reactions



M = Transition metal (Pd, Ni, Cu, etc.)

**Way C:** Metal-free radical-mediated cross-dehydrogenative coupling (CDC) reactions



## Литература

1. Akulov A.A., Varaksin M.V., Mampuyts P., Charushin V.N., Chupakhin O.N., Maes B.U.W. *Org. Biomol. Chem.*, 2021, **19**, 297.
2. Akulov A.A., Varaksin M.V., Tsmokalyuk A.N., Charushin V.N., Chupakhin O.N., *Green Chem.*, 2021, **23**, 2049.
3. Moseev T.D., Varaksin M.V., Gorlov D.A., Charushin V.N., Chupakhin O.N. *J. Org. Chem.*, 2020, **85**, 11124.
4. Smyshliaeva L.A., Varaksin M.V., Slepukhin P.A., Chupakhin O.N., Charushin V.N., *Beilstein J. Org. Chem.*, 2018, **14**, 2618.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-73-10077.

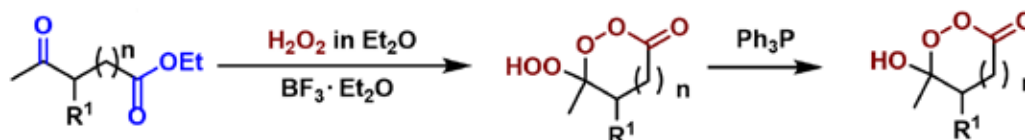
# СИНТЕЗ ЦИКЛИЧЕСКИХ АЦИЛПЕРОКСИДОВ

**Виль В.А., Барсегян Я.А., Терентьев А.О.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: vil@ioc.ac.ru*

Более чем вековая история химии органических пероксидов тесно связана с производством широкого ряда практически ценных молекул и материалов: противомаларийных, антигельминтных, и противомикробных препаратов, окислителей, инициаторов полимеризации, а также взрывчатых соединений. Несмотря на долгую историю развития химии пероксидов, их селективный синтез и труднодоступность как определенных классов пероксидов, так и отдельных структур остаются фундаментальной проблемой.

Были разработаны подходы к синтезу  $\beta/\gamma$ -гидроперокси  $\beta/\gamma$ -пероксилактонов – стабильных циклических перокси-интермедиатов Криге, на основе взаимодействия кетоэфиров с  $H_2O_2$  в присутствии  $BF_3 \cdot Et_2O$  [1–3]. Обнаружено, что мягкое восстановление гидроперокси-пероксида приводит к  $\beta/\gamma$ -гидрокси  $\beta/\gamma$ -пероксилактонам – стабильным циклическим интермедиатам Криге [1, 3].



Исследования в области внутримолекулярных взаимодействий привели нас к изучению природы фундаментального интермедиата в химии пероксидов – пероксикарбениевого иона. Открытие дестабилизирующего эффекта акцепторных групп на пероксикарбениевый ион позволило разработать трехкомпонентную конденсацию  $\beta$ -кетоэфиров,  $H_2O_2$  и спиртов с получением нового класса пероксидов –  $\beta$ -алкокси- $\beta$ -пероксилактонов с выходами от умеренного до высокого [4].



## Литература

1. V.A. Vil', G.d.P. Gomes, O.V. Bitjukov, K.A. Lyssenko, G.I. Nikishin, I.V. Alabugin, A.O. Terent'ev, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *130*, 3430.
2. V.A. Vil', G.d.P. Gomes, M.V. Ekimova, K.A. Lyssenko, M.A. Syroeshkin, G.I. Nikishin, I.V. Alabugin, A.O. Terent'ev, *J. Org. Chem.*, **2018**, *83*, 13427.
3. V.A. Vil', Y.A. Barsegyan, L. Kuhn, M.V. Ekimova, E.A. Semenov, A.A. Korlyukov, A.O. Terent'ev, I.V. Alabugin, *Chem. Sci.*, **2020**, *11*, 5313.
4. V.A. Vil', Y.A. Barsegyan, D.V. Barsukov, A.A. Korlyukov, I.V. Alabugin, A.O. Terent'ev, *Chem. A Eur. J.*, **2019**, *25*, 14460.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-43-04417.*

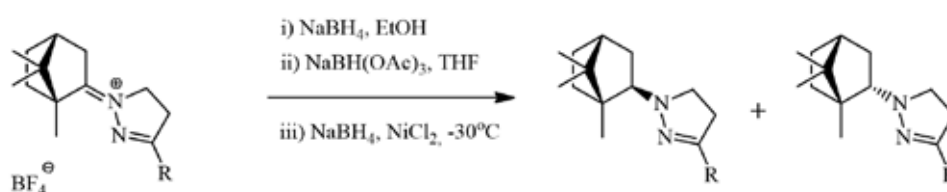
# СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОЕ ПОЛУЧЕНИЕ ПИРАЗОЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ КАМФОРЫ

**Ворожцов Н.И., Петкова А.И., Белоглазкина Е.К.**

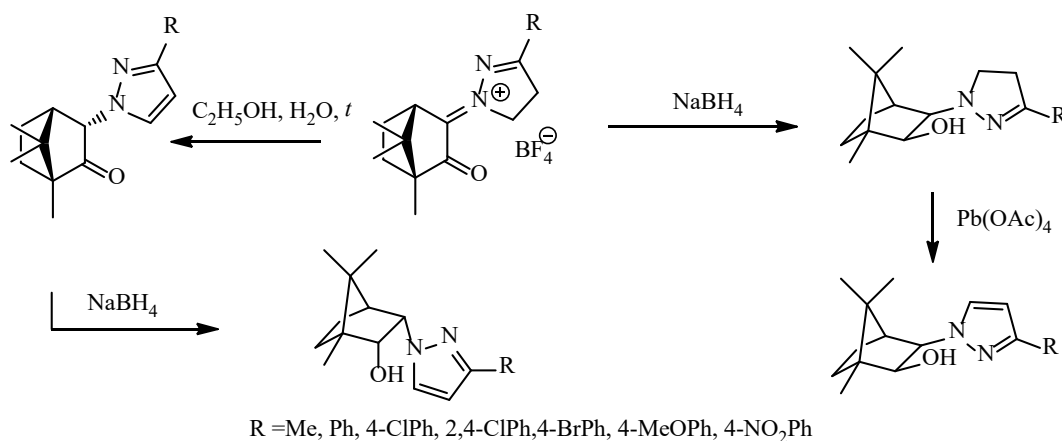
*МГУ имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия  
e-mail: nvor@rambler.ru*

Синтез гетероциклов на основе природных соединений является одним из перспективных направлений медицинской и органической химии. В настоящее время известны примеры получения гетероциклических структур, содержащих терпеновый фрагмент, в том числе и производных пиразола [1]. Однако при синтезе таких соединений, остро стоит вопрос проведения стереоселективного синтеза, для получения соединений с определенным расположением заместителей. В работах [2,3] изучался вопрос стереоселективного восстановления иминов, полученных на основе (+) камфоры.

Нами было показано, что при восстановлении борфторидных солей полученных при взаимодействии камфоры и 3-арилпиразолинов, боргидридом натрия образуется смесь *эндо*- и *экзо*-изомерных продуктов в соотношении 6:1 после перекристаллизации из метанола. Использование триацетоксиборгидрида натрия, приводило к смеси изомеров давая соотношение 2:1 после перекристаллизации из метанола. В попытке воспроизвести стереоселективное восстановление боргидридом натрия в присутствии солей  $\text{NiCl}_2$  [3] вместо ожидаемого *экзо*- изомера была получена смесь 1-борнилпроизводных пиразолина и пиразола в соотношении 4:1:



Основываясь на открытой нами перегруппировке пиразолиновых солей, полученных на основе камфороксиона, предложен метод получения пиразольных производных с *ди-эндо* и *ди-экзо*-расположением заместителей.



*Структуры полученных соединений подтверждены данными РСА.*

## Список литературы

1. Uros<sup>ˆ</sup> Gros<sup>ˆ</sup> elj, at al // Tetrahedron. 2005. v. 61. p. 3991–3998.
2. Sokolova, N., et al., Discovery of a new class of antiviral compounds: Camphor imine derivatives. European journal of medicinal chemistry, 2015. 105: p. 263-273.
3. Afanasyev, O.I., et al., Direct Reductive Amination of Camphor Using Iron Pentacarbonyl as Stoichiometric Reducing Agent: Features and Limitations. European Journal of Organic Chemistry, 2020. 2020(39): p. 6289-6294
4. Vorozhtsov, N.I., et al., Synthesis and antiviral activity of novel 3-substituted pyrazolinium salts. Chemistry of Heterocyclic Compounds, 2021.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-03-00680*

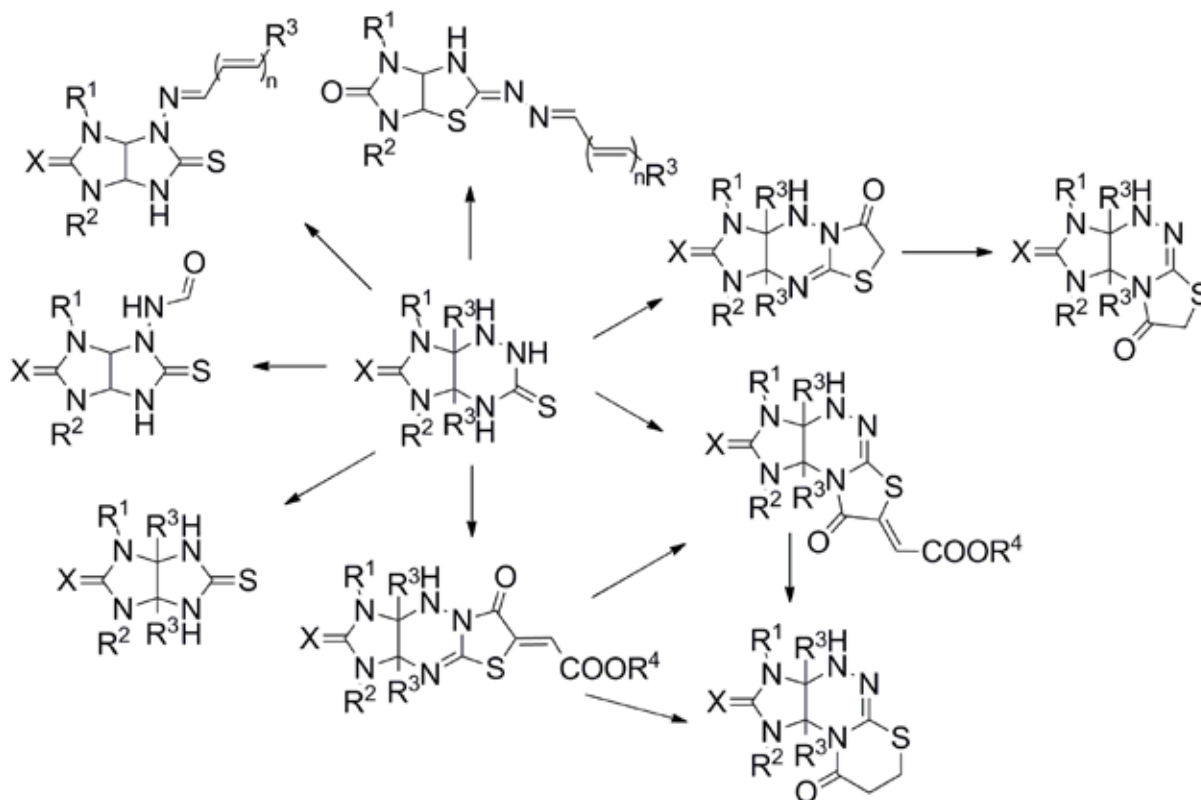
# ИМИДАЗО[4,5-*e*]-1,2,4-ТРИАЗИНЫ В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Газиева Г.А., Измestьев А.Н., Виноградова Е.Е., Виноградов Д.Б.,  
Купцова А.О.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект, 47  
e-mail: gaz@ioc.ac.ru*

1,2,4-Триазины являются перспективным классом гетероциклических соединений для поиска на их основе биологически активных веществ, агрохимикатов, красителей. Кроме того, 1,2,4-триазины, в том числе гетероаннелированные примеры таких соединений, благодаря разнообразной реакционной способности могут использоваться для получения других гетероциклических соединений: производных пиридина, пиримидина, триазола, имидазола.

С целью синтеза новых гетероциклических соединений с потенциальной биологической активностью в настоящей работе рассмотрены реакции имидазо[4,5-*e*]-1,2,4-триазин-3-тионов и имидазо[4,5-*e*]тиазоло[3,2-*b*]-1,2,4-триазин-7-онов, протекающие с сужением, расширением или перегруппировкой триазинового или тиазольного цикла.



*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-03-00765.*

# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА 1,2,3-ТРИАЗОЛО[5,1-*b*]1,3,4-ТИАДИАЗИНОВ

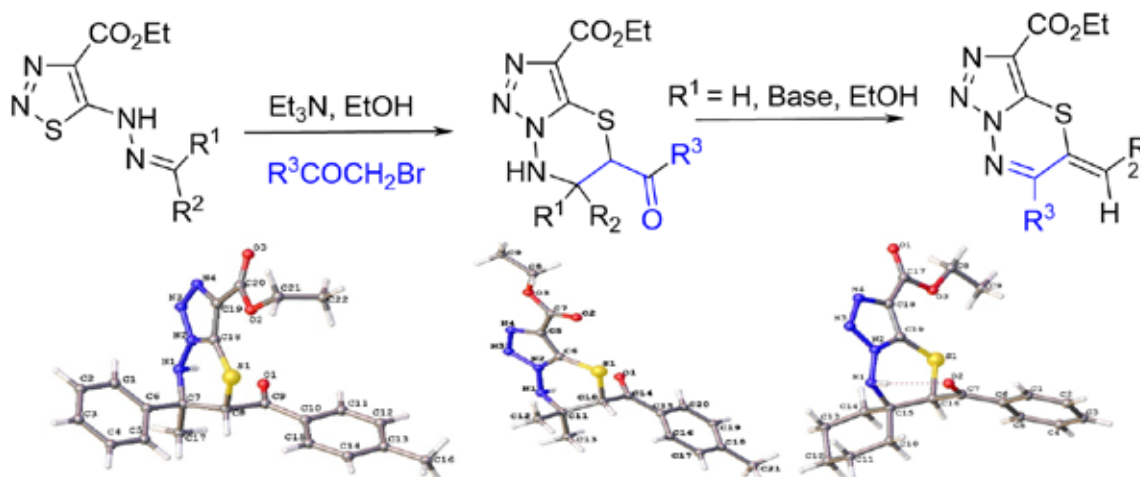
[Глухарева Т.В.](#),<sup>a,b</sup> [Высокова О.А.](#),<sup>a</sup> [Обыденнов К.Л.](#),<sup>a</sup> [Калинина Т.В.](#)<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, Россия, Екатеринбург, ул. Мира, 19*

<sup>b</sup> *Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН, 620990, Россия, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22 / Академическая, 20  
e-mail: [taniagluhareva@yandex.ru](mailto:taniagluhareva@yandex.ru)*

Нестандартным способом синтеза гетероциклических структур является метод перегруппировок и трансформаций одних гетероциклов в другие.

Нами была исследована трансформация 1,2,3-тиадиазолилгидразонов альдегидов и кетонов в 6,7-дигидро-5Н-[1,2,3]триазоло[5,1-*b*][1,3,4]тиадиазины. Обнаружено, что при взаимодействии 6,7-дигидро-5Н-[1,2,3]триазоло[5,1-*b*][1,3,4]тиадиазинов с основаниями образуются 5-бензилиден-5Н-[1,2,3]триазоло[5,1-*b*][1,3,4]тиадиазины при этом происходит перегруппировка и дегидратация тиадиазинового цикла.



Исследование влияния полученных веществ на пролиферацию животных клеток различных типов показало, что они избирательно подавляют или стимулируют их пролиферацию. Некоторые из соединений стимулировали рост нормальных фибробластов кожи человека, оказывая при этом ингибирующее действие на опухолевые и трансформированные линии клеток.

Этиловый эфир 5'-(4-этоксibenzoил)-5',7'-дигидроспиро[циклопентан-1,6'-[1,2,3]триазоло[5,1-*b*][1,3,4]тиадиазин]-3'-карбоновой кислоты был изучен на крысах для лечения резаных и ожоговых кожных ран. Было обнаружено, что это соединение оказывает стимулирующее действие на пролиферацию фибробластов кожи, увеличивая регенеративный потенциал поврежденной ткани. Оценка течения раневого процесса показала, что использование исследуемого вещества явно ускорило ход восстановительной регенерации покровов по сравнению с контролем.



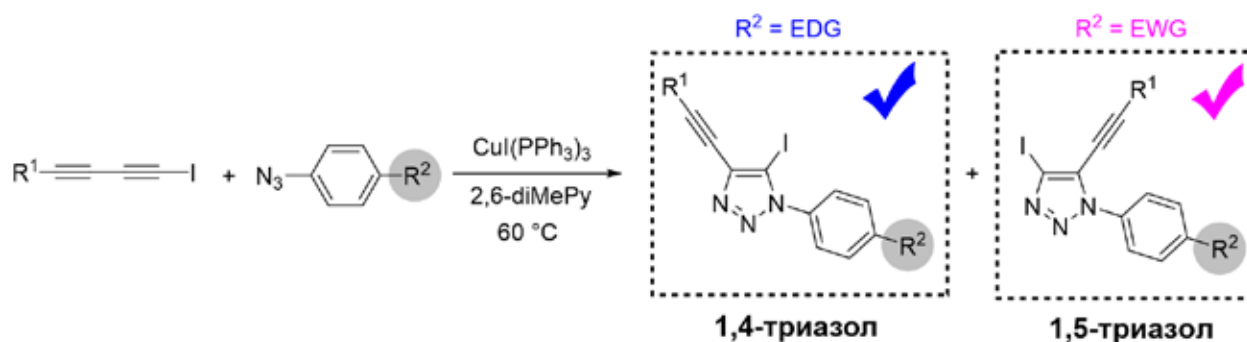
# CUAAS БУТА-1,3-ДИИНОВ С АРИЛАЗИДАМИ: НЕТРИВИАЛЬНАЯ РЕГИОСЕЛЕКТИВНОСТЬ

**Говди А.И., Данилкина Н.А., Балова И.А.**

*Институт Химии, Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7/9,  
e-mail: n\_govdi@mail.ru*

Медь-катализируемое азид-алкиновое циклоприсоединение (CuAAC) является одним из наиболее широко используемых методов синтеза 1,4-дизамещенных 1,2,3-триазолов из терминальных алкинов. Открытие CuAAC для галогеналкинов позволило использовать эту реакцию для региоселективного получения 5-галоген-1,4-дизамещенных 1,2,3-триазолов<sup>1</sup>. Несмотря на то, что рутений(II)-катализируемое азид-алкиновое циклоприсоединение (RuAAC) для терминальных алкинов позволяет получать уже 1,5-дизамещенные 1,2,3-триазолы<sup>2</sup>, замена терминальных алкинов на галогеналкины, в случае RuAAC, не меняет региоселективность циклоприсоединения<sup>3</sup>. Синтезировать 4-бромтриазолы всё же можно, но при катализе комплексами иридия<sup>4</sup>. В то же время, вопрос синтеза 4-иод-1,5-дизамещенных триазолов остается открытым.

Нами было обнаружено, что при взаимодействии 1-иодбута-1,3-диинов с арилазидами образуется не только ожидаемый 1,4-триазол, но также и второй 1,5-региоизомер. При этом доля 1,5-триазола возрастает для арилазидов с электрооакцепторными заместителями.



Найденное превращение является уникальной реакцией для иодзамещенных диацетиленовых соединений и ароматических азидов. Замена арилазидов на алкилазиды в случае диацетиленов или же переход от иодбутадиinov к иодмоноалкинам для арилазидов дают исключительно привычные продукты 1,4-циклоприсоединения.

## Литература

1. Hein J.E. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2009, **48**, 8081.
2. Zhang L. et al. *J. Am. Chem. Soc.*, 2005, **127**, 15998.
3. Oakdale J.S. et al. *Chem. Eur. J.*, 2014, **20**, 11101.
4. Rasolofonjatovo E. et al. *Org. Lett.*, 2013, **15**, 4698–4701.

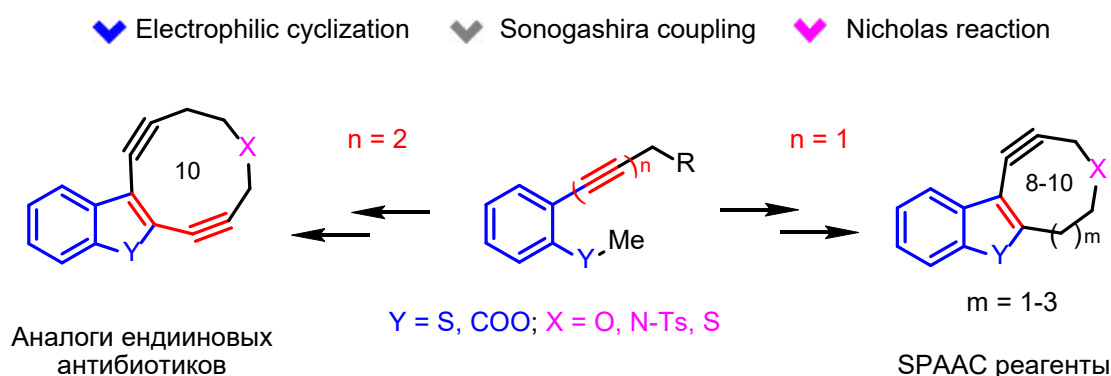
*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-10077.*

# НАПРЯЖЕННЫЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ АЛКИНЫ, КОНДЕНСИРОВАННЫЕ С ГЕТЕРОЦИКЛАМИ: СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ

Данилкина Н.А., Балова И.А.

*Институт Химии, Санкт-Петербургский государственный университет,  
199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7/9,  
e-mail: n.danilkina@spbu.ru*

Алкины являются связующим синтетическим звеном между основными классами органических соединений, а также позволяют переходить к различным типам гетероциклических молекул. Отдельного внимания заслуживают напряженные циклические алкины. Интерес к циклоалкинам обусловлен не только высоким синтетическим потенциалом «изогнутой» тройной связи, но и благодаря их практической ценности как противоопухолевых агентов (ендиинового антибиотика)<sup>1</sup> и как реагентов для биоортогональной биоконъюгации (циклооктины)<sup>2</sup>.



Нами был разработан общий синтетический подход для получения гетероциклических аналогов ендиинового антибиотика и моноацетиленовых циклоалкинов. Синтез включает три ключевых стадии – электрофил-прототируемую циклизацию ди- или моноацетиленов, реакцию Соногашеры и замыкание цикла по Николасу. Данный подход позволяет варьировать как природу приконденсированного гетероцикла, так и природу гетероатома в циклическом алкине. Важно, что оба гетероциклических элемента влияют на стабильность циклических алкинов и их свойства. Рациональный структурный дизайн с применением квантово-химических расчётов позволяет получать как аналоги ендиинового антибиотика, так и SPAAC реагенты для биоконъюгации с оптимальным балансом стабильность-активность.

## Литература

- Romeo, R.; Giofre, S. V.; Chiacchio, M. A. *Curr. Med. Chem.* 2017, **24**, 3433–3484.
- Dommerholt, J.; Rutjes, F. P. J. T.; van Delft, F. L. *Top. Curr. Chem.* 2016, **374**, 16.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (21-13-00218) и РФФИ (20-03-00117).*

# ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЕ 1,4-*CNCO*-ДИПОЛЕЙ, ГЕНЕРИРУЕМЫХ ИЗ ДИПИРАЗОЛОДИОКСАДИАЗОЦИНОВ

**Дмитриев М.В., Белозерова А.И., Жуланов В.Е., Масливец А.Н.**

Пермский государственный национальный исследовательский университет,  
 614068, Пермь, ул. Букирева 15,  
 e-mail: dmax@psu.ru

За последние несколько десятилетий реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения превратились в мощный и эффективный инструмент синтеза широкого спектра гетероциклических соединений. В то же время на сегодняшний день известно весьма ограниченное количество способов генерирования 1,4-диполей. Одним из наиболее часто используемых способов генерирования 1,4-диполей является взаимодействие азотсодержащих гетероциклов с электронодефицитными алкинами или алкенами, позволяющее генерировать *in situ* 1,4-диполи *CNCC* типа. Недавно нами предложен новый метод генерирования 1,4-диполей более редкого *CNCO* типа, содержащих пиразольный фрагмент, путем термолиза их димеров – замещенных дипиразолдиоксидазацинов (схема 1)<sup>1</sup>.

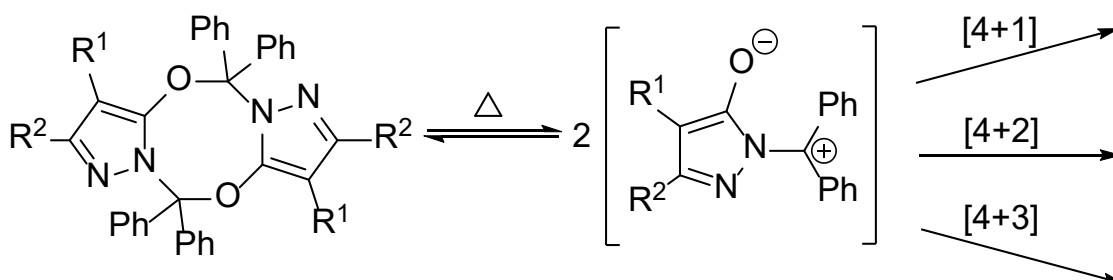


Схема 1.

Генерируемые таким способом 1,4-*CNCO*-диполи участвуют в реакциях [4+1], [4+2] и [4+3] циклоприсоединения.

## Литература

1. Zhulanov V.E., Vigovskaya V.A., Dmitriev M.V., Silaichev P.S., Maslivets A.N., Rubin M. *Organic & biomolecular chemistry*, 2020, **18**(17), 3382.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 19-13-00290).

# ЗОЛОТО-КАТАЛИЗИРУЕМЫЕ РЕАКЦИИ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ ИНАМИДОВ И ЦИАНАМИДОВ В СИНТЕЗЕ АЗАГЕТЕРОЦИКЛОВ

[Дубовцев А.Ю.](#)

Санкт-Петербургский государственный университет,  
199034, Санкт-Петербург, Университетская набережная, 7/9  
e-mail: alexchem92@yandex.ru

Инамиды – это амиды, несущие алкиновый фрагмент при атоме азота. Благодаря сопряжению амидного азота с тройной углерод-углеродной связью, инамиды обладают повышенной реакционной способностью по сравнению с обычными алкинами, а направление реакций инамидов предсказуемо и легко контролируется. Всё это объясняет лавинообразный рост числа публикаций, посвящённых химии инамидов в последнее десятилетие. Особое внимание исследователей привлекают реакции циклоприсоединения инамидов, ведущие к разнообразным гетероциклам.

В представляемом докладе будут рассмотрены следующие результаты, полученные в научной группе докладчика (Рисунок 1):

- золото- и кислото- катализируемый региодивергентный синтез 2,4,6-триаминопиримидинов и 1,3-диаминоизохинолинов из инамидов и цианамидов [*Adv. Synth. Catal.*, 2020, **362**, 2672; *Org. Biomol. Chem.*, 2021, **19**, в печати];
- золото-катализируемый синтез 2,6-диаминопиридинов из енинамидов и цианамидов [*J. Org. Chem.*, 2021, **86**, 7218];
- золото-катализируемый синтез  $\beta$ -карболинов из индолилинамидов и цианамидов.

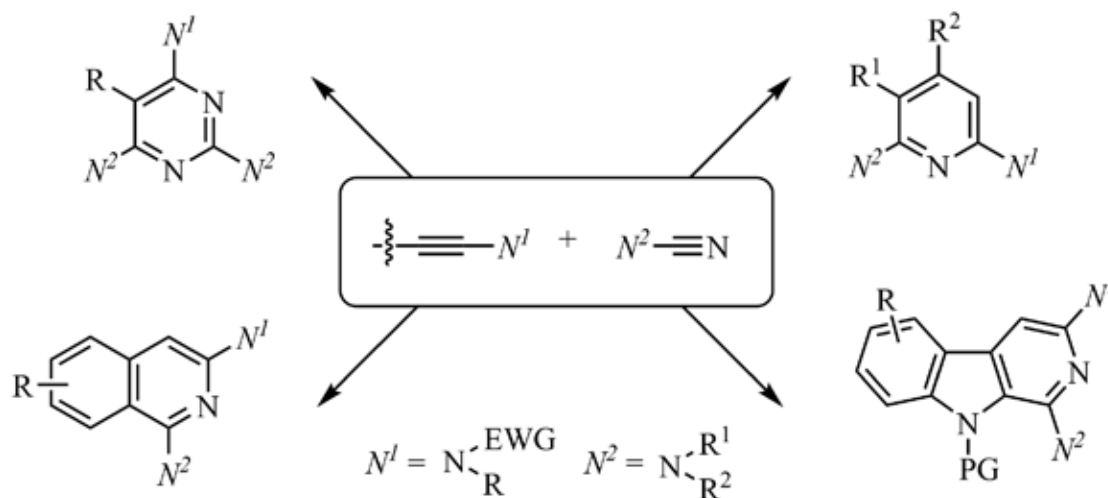


Рисунок 1

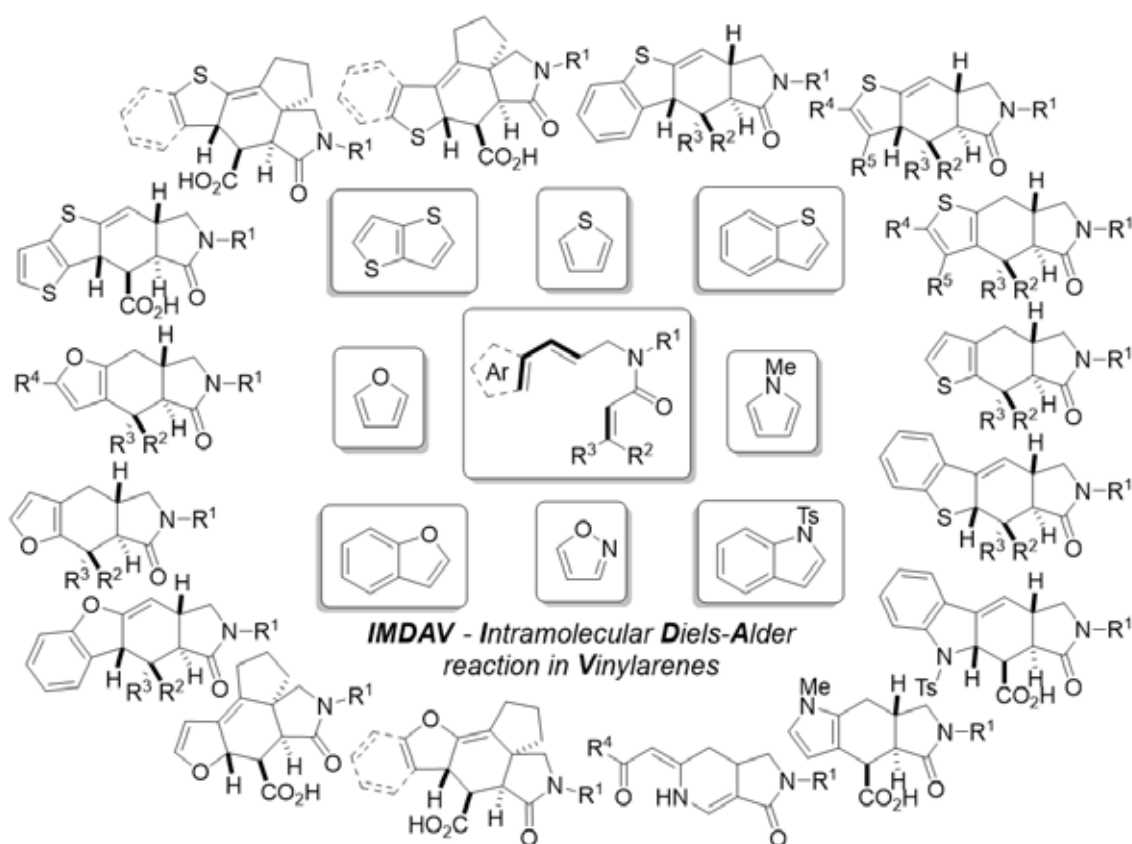
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-73-10022.

# IMDAV ПОДХОД В СИНТЕЗЕ ПОЛИГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Зайцев В.П.**, Присяжнюк Е.Д., Яковлева Е.Д., Показеев К.М.,  
Надилова М.А., Мерцалов Д.Ф., Зубков Ф.И.

Российский университет дружбы народов, Россия, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6,  
e-mail: vzaitsev@sci.pfu.edu.ru

В настоящей работе обобщены данные, касающиеся реакции внутримолекулярного [4+2] циклоприсоединения винил-замещенных фуранов, тиофенов, пирролов, индолов и изоксазолов (IMDAV реакция).<sup>1-4</sup>



Предложенный подход отличается простотой, малостадийностью и приводит к получению большой библиотеки полигетероциклических соединений.

## Литература

1. Nadirova M.A., Laba Y.V., Zaytsev V.P. et al. *Synthesis*, 2020, **52**, 2196.
2. Horak Y.I., Lytvyn R.Z., Laba Y.V., Zaytsev V.P. et al. *Tetrahedron Lett*, 2017, **58**, 4103.
3. Zubkov F.I., Zaytsev V.P., Mertsalov D.F. et al. *Tetrahedron*, 2016, **72**, 2239.
4. Horak Y.I., Lytvyn R.Z., Zaytsev V.P. et al. *Tetrahedron Lett*, 2015, **56**, 4499.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты 19-03-00807 А и 19-53-04002 Бел\_мол\_а.

# ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫЕ ЦИКЛОПРОПАНЫ: РЕАКЦИИ ИЗОМЕРИЗАЦИИ, ДИМЕРИЗАЦИИ И РАСШИРЕНИЯ ЦИКЛА

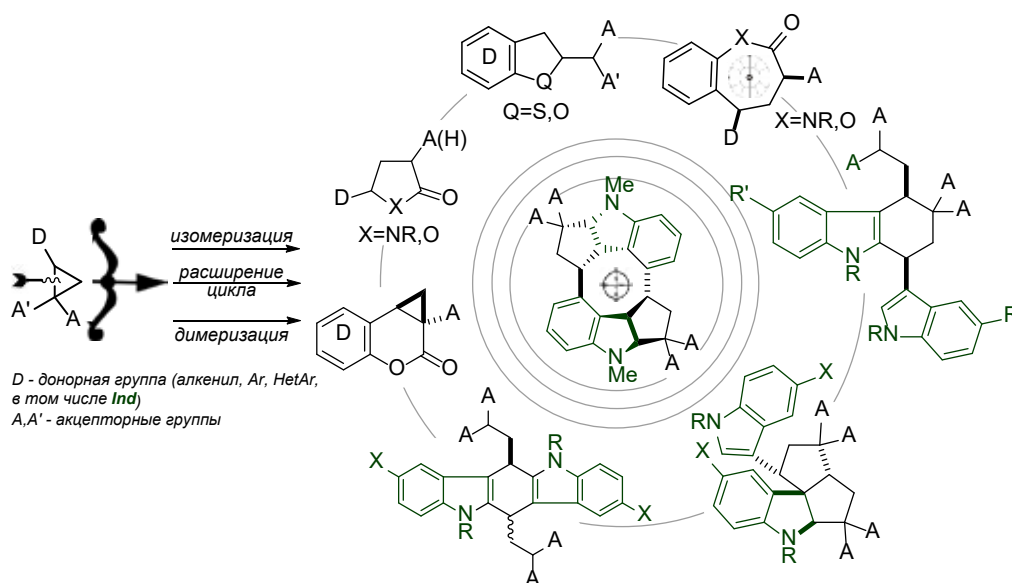
**Иванова О.А.**<sup>a</sup> Чагаровский А.О.,<sup>a</sup> Жохов С.С.,<sup>a</sup> Андреев И.А.,<sup>b</sup> Ратманова Н.К.,<sup>b</sup>  
Рыбаков В.Б.,<sup>a</sup> Трушков И.В.<sup>b,c</sup>

<sup>a</sup> МГУ имени М.В.Ломоносова, Химический факультет,  
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, ГСП-3,  
e-mail: iv@kinet.chem.msu.ru

<sup>b</sup> ФГБУ «НМИЦ ДГОИ им. Дмитрия Рогачева» Минздрава России

<sup>c</sup> Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского

Донорно-акцепторные циклопропаны зарекомендовали себя как удобные строительные блоки в синтезе широкого разнообразия гетероциклов. Присутствие многих реакционных центров в их молекулах позволяет им участвовать в широком спектре атом-экономичных процессов, в том числе протекающих без какого-либо партнера, 1-3 а именно: а) в реакциях изомеризации, б) реакциях расширения цикла и с) в циклодимеризациях. Эти превращения открывают эффективные пути к синтезу различных биоактивных соединений, при этом хемо- и стереоселективность процессов можно регулировать условиями проведения реакции, в первую очередь, применяемой кислотой Льюиса, а также природой донорного заместителя.



## Литература

1. Ivanova O.A.; Andronov V.A.; Vasin V.S.; Shumsky A.N.; Rybakov, V.B.; Voskressensky, L.G.; Trushkov, I.V. *Org. Lett.* 2018, **20**, 7947.
2. Ivanova O.A., Andronov V.A., Levina I.I., Chagarovskiy A.O., Voskressensky L.G., Trushkov I.V. *Molecules* 2019, **24**, 1 (57).
3. Chagarovskiy A.O., Vasin V.S., Kuznetsov V.V., Ivanova O.A., Rybakov V.B., Shumsky A. N., Makhova N.N., Trushkov I.V. *Angew. Chem., Int. Ed.* 2018, **57**, 10338.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 21-73-20095.

# СИНТЕЗ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ВИНИЛБЕНЗИОДОКСОЛОВ

[Йошимура А.](#),<sup>а</sup> Сайто А.,<sup>б</sup> Постников П.С.,<sup>а</sup> Юсубов М.С.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> *Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий,  
Томский политехнический университет, 634050, Томск, проспект Ленина 30,  
e-mail: yoshimura@tpu.ru*

<sup>б</sup> *Tokyo University of Agriculture and Technology, Division of Applied Chemistry, Japan,  
183-8538 Tokyo, Fuchu, Harumicho, 3 Chome-8-1*

Производные бензиодоксолов применяются в органическом синтезе в качестве универсальных окислителей для различных субстратов.<sup>1</sup> В последнее время значительно возросло внимание к винилбензиодоксолам, которые могут эффективно использоваться в реакциях алкенилирования. В литературе<sup>2-4</sup> описаны различные методы их синтеза и показана их реакционная способность, однако, ранее не была изучена возможность получения винилбензиодоксолов, используя в качестве субстратов псевдоциклические винил-производные соединения поливалентного иода (III). Так, мы предлагаем общую методику синтеза псевдоциклических винил-производных соединений иода (III), которые могут быть легко получены из 2-иодозилбензойной кислоты и соответствующего алкина в присутствии трифторметансульфокислоты или её ангидрида (рисунок 1).

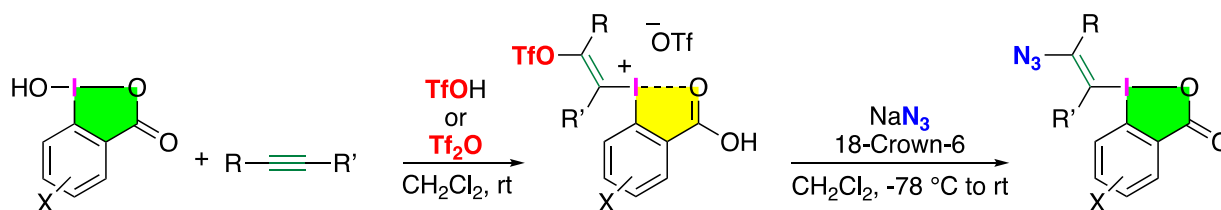


Рисунок 1. Синтез псевдоциклических винил-производных соединений иода (III)

Полученные псевдоциклические винилбензиодоксоламы могут быть переведены в циклическую форму без изменения конфигурации при кратной связи, используя реакцию присоединения-элиминирования.

## Литература

1. N. Declas, G. Pisella, J. Waser. *Helv. Chim. Acta*, **2020**, 103, 12, e2000191.
2. W. Ding, J. Chai, C. Wang, J. Wu, N. Yoshikai, *J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, 142, 8619.
3. P. Caramenti, N. Declas, R. Tessier, M. D. Wodrich, J. Waser, *Chem. Sci.*, **2019**, 10, 3223.
4. L. Castoldi, E. M. Di Tommaso, M. Reitti, B. Graefen, B. Olofsson, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, 59, 15512.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-73-20031.



# ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ХРОМОФОРЫ СОСТАВА АНИЛИН-ДИВИНИЛХИНОКСАЛИН-ТРИЦИАНОДИГИДРОФУРАН: СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И ФЕМТОСЕКУНДНАЯ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ «ГОСТЬ-ХОЗЯИН» ПОЛИМЕРОВ НА ИХ ОСНОВЕ

**Калинин А.А.,<sup>а</sup> Фазлеева Г.М.,<sup>а</sup> Исламова Л.Н.,<sup>а</sup> Шарипова С.М.,<sup>а</sup>  
Вахонина Т.А.,<sup>а</sup> Шмелев А.Г.,<sup>б</sup> Балакина М.Ю.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup>Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова Федерального исследовательского центра «Казанский научный центр РАН»,  
420088, Россия г. Казань, ул. Академика Арбузова, 8;  
e-mail: kalesha007@mail.ru

<sup>б</sup>Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского  
Федерального исследовательского центра «Казанский научный центр РАН»,  
420029, Россия, г. Казань, Сибирский тракт, 10/7

В докладе обсуждаются синтез и фото-физические свойства хромофоров состава анилин-дивинилхиноксалин-трицианодигидрофуран (**I**, **II**) с различными заместителями в донорном/акцепторном фрагментах и нелинейно-оптическая (НЛО) активность электретирированных тонких пленок композиционных материалов на основе полиметилметакрилата и соединений **I** и **II**, изученная методом генерации второй гармоники с применением фемтосекундного лазерного излучения ( $\lambda=1028$  нм).

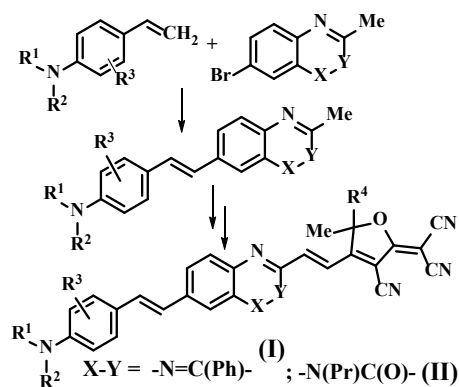


Схема 1. Синтез хромофоров I и II;

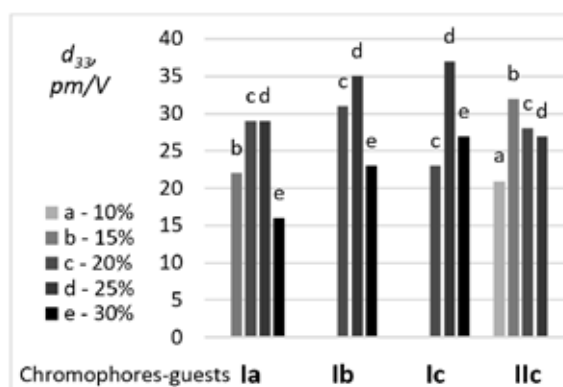


Рисунок 1. НЛО коэффициенты,  $d_{33}$  материалов, допированных различным масс.% содержанием тремя хромофорами I с  $R^4 = Ph$  (Ia), Tol (Ib), PhCy (Ic) и IIc с  $R^4 = PhCy$  (для всех  $R^1 = R^2 = Bu$ ,  $R^3 = H$ ) [1].

## Литература:

1. Kalinin A.A., Islamova L.N., Shmelev A.G., Fazleeva G.M., Fominykh O.D., Dudkina Y.B., Vakhonina T.A., Levitskaya A.I., Sharipova A.V., Mukhtarov A.S., Khamatgalimov A.R., Nizameev I.R., Budnikova Y.H., Balakina M.Y. *Dyes Pigment.* 2021, **184**, 108801.

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 21-13-00206).

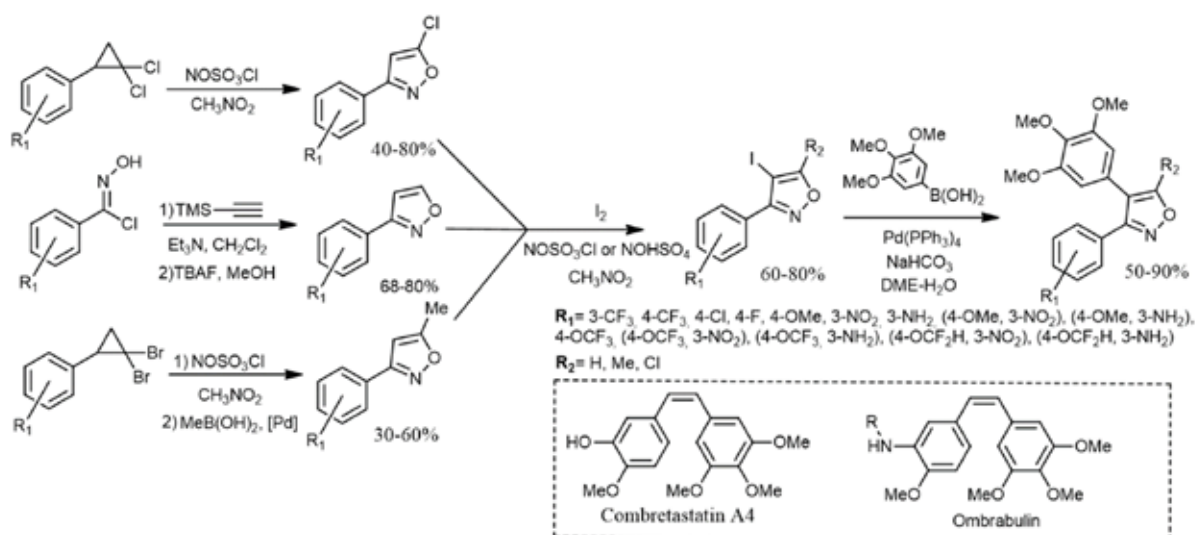
# НОВЫЕ ПОДХОДЫ К 3,4-ДИАРИЛИЗОКСАЗОЛАМ - АНАЛОГАМ КОМБРЕТАСТАТИНА А4

**Каретников Г.Л., Мосейчева А.А., Васильева Л.А., Бондаренко О.Б.**

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,  
 Российская Федерация, 119991, Москва, Ленинские горы, 1.  
 e-mail: geokaret@yandex.ru

Система тубулиновых микротрубочек играет важную роль во многих клеточных процессах, поэтому они считаются привлекательной мишенью для потенциальных противоопухолевых агентов. *Комбретастатин А-4* является одним из наиболее перспективных тубулин-ингибирующих лигандов, поскольку проявляет исключительную цитотоксичность по отношению к множеству линий опухолевых клеток<sup>1</sup>. Однако в связи с низким барьером перехода из активной *цис*- в неактивную *транс*-форму и плохой растворимостью *Комбретастатина А4* необходима разработка его более стабильных аналогов.

Решением конформационной проблемы *Комбретастатина А4* является фиксация олефинового фрагмента путем включения его в гетероциклическую структуру, в частности, в изоксазольный цикл<sup>2</sup>.



Нами разработан набор подходов к новым конформационно стабилизированным аналогам *Комбретастатина А4* ряда 3,4-диарилизоксазола и исследована их противоопухолевая активность на избранных клеточных линиях.

## Литература

1. Quan, Y. P., et. al. *MedChemComm*, **2018**, 9(2), 316-327.
2. Sun, C. M., et. al. *Bioorg. & Med. Chem. Lett.*, **2007**, 17(4), 1078-1081.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №20-33-90030

# N-АРИЛСУЛЬФОНИЛИМИНЫ ПОЛИХЛОРАЛЬДЕГИДОВ В РЕАКЦИИ С ЦИКЛОПЕНТАДИЕНОМ

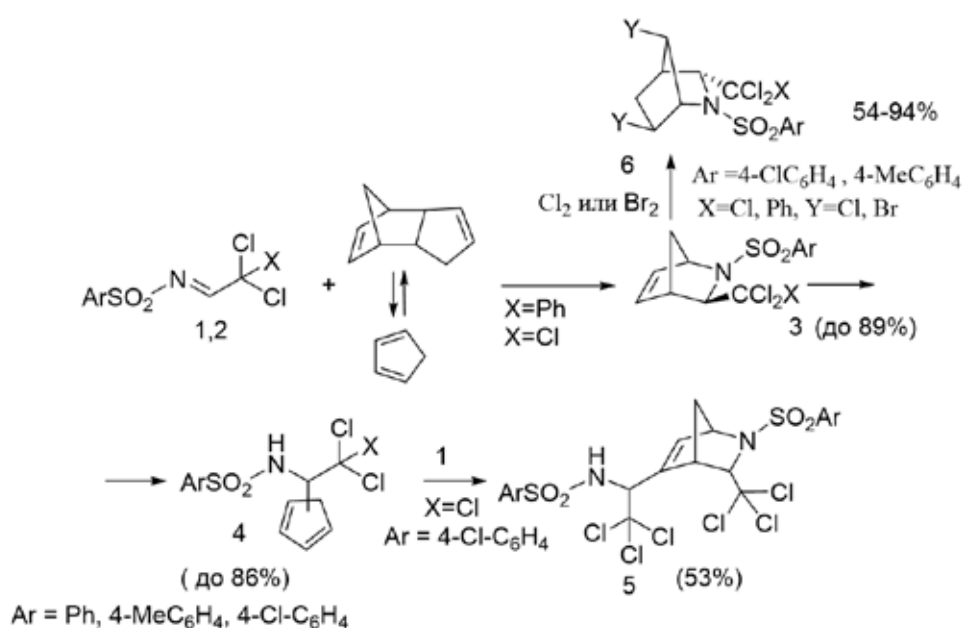
[Катеринич М.Д.](#),<sup>а,б</sup> Чернышёва Г.Н.,<sup>б</sup> Розенцвейг И.Б.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Иркутский государственный университет, хим. факультет,  
ул. Лермонтова, д.126,

Иркутск, 664033, Россия, e-mail [maks.katerinich.1997@mail.ru](mailto:maks.katerinich.1997@mail.ru)

<sup>б</sup>Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН,  
ул. Фаворского, д. 1, Иркутск, 664033, Россия

В настоящей работе нами в реакцию с циклопентадиеном были вовлечены сульфолимины полихлоральдегидов **1,2**. Установлено, что в зависимости от условий реакция может не только приводить к циклоаддуктам **3**, но и протекать с образованием ранее неизвестных амидоалкилированных производных циклопентадиена **4**, а также амидоалкилированных циклоаддуктов **5**.



При галогенировании соединений **3** в хлороформе или трихлорэтилене происходит образование 6,7-дигалогензамещенных производных **6** соответственно с выходом до 94%, тогда как, ожидаемые классические продукты присоединения галогенов к кратной связи выделены не были.

Строения синтезированных соединений доказаны с помощью ЯМР, ИК спектроскопии и методом РСА.

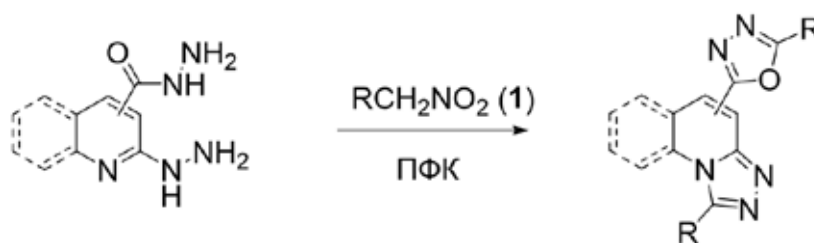
# ЭЛЕКТРОФИЛЬНАЯ АКТИВАЦИЯ НИТРОАЛКАНОВ В ДВОЙНОМ АННЕЛИРОВАНИИ [1,2,4]ТРИАЗОЛО[4,3-*a*]ХИНОЛИНОВ И 1,3,4-ОКСАДИАЗОЛЬНЫХ КОЛЕЦ

Кирилов Н.К., Аксенов А.В., Аксенов Н.А.

Северо-Кавказский федеральный университет, 355009, Ставрополь, ул. Пушкина 1а.

E-mail: lycheron@gmail.com

Нитроалканы, активированные полифосфорной кислотой, могут служить эффективными электрофилами в реакциях с аминами и гидразинами, обеспечивая различные каскадные превращения в гетероциклических системах<sup>1</sup>. Эта стратегия была использована нами для разработки инновационного синтеза, использующего одновременное аннелирование двух различных гетероциклических ядер и получение [1,2,4]триазоло[4,3-*a*]хинолинов с 1,3,4-оксадиазольными заместителями. Данная реакция протекает при 130 °С за 2 часа с хорошими выходами (50-80%).



R = Et; *n*-C<sub>7</sub>H<sub>15</sub>; H; PhCO; CO<sub>2</sub>Et

Рисунок 1. Схема реакции

## Литература

1. Аксенов, Н. А., Аксенов, А. В., Кирилов, Н. К., Арутюнов, Н. А., Аксенов, Д. А., Масливец, В., ... Корниенко, А. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 2020 **18**(34), 6651-6664.

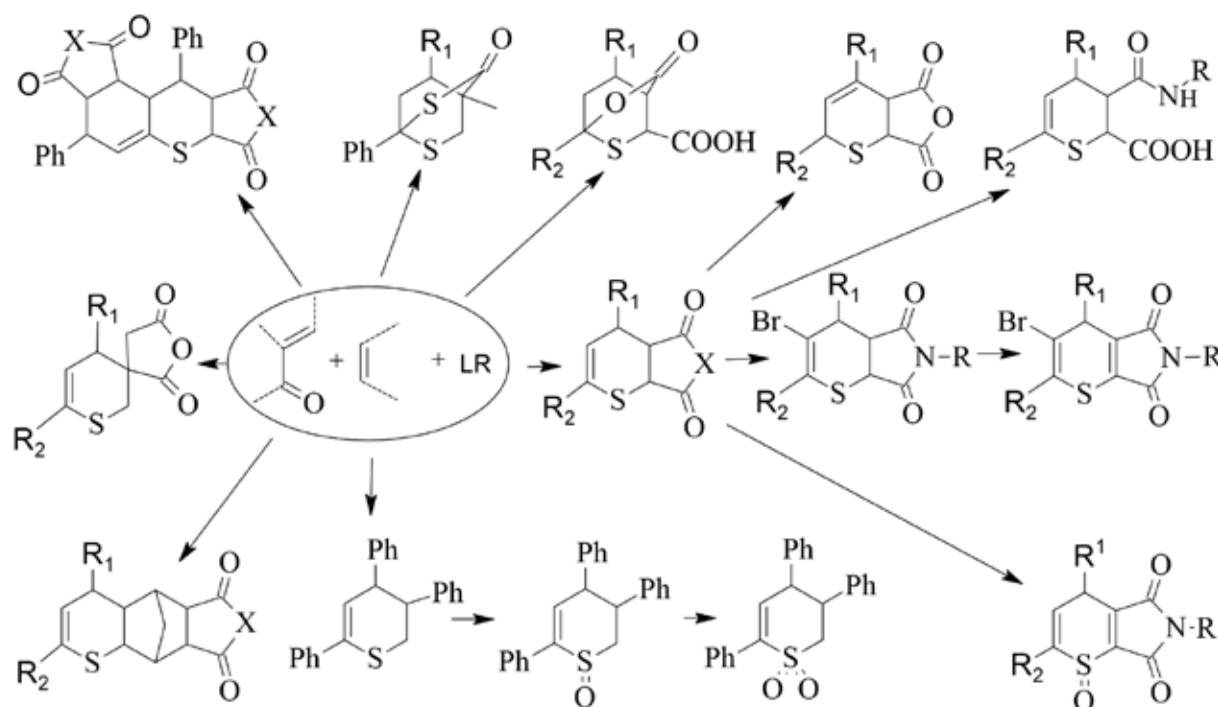
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-33-90026, Министерства образования и науки Российской Федерации (тема 0795-2020- 0031).

# СИНТЕЗ И ДАЛЬНЕЙШИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ 3,4-ДИГИДРО-2H-ТИОПИРАНОВ

**Колобов А.В., Меркулова Е.А., Старостин М.В., Овчинников К.Л.**

*Ярославский государственный технический университет,  
Московский просп., 88, Ярославль, 150023,  
e-mail: kolobovav@ystu.ru*

Разработаны методы получения соединений ряда тиопирана на основе одnoreакторного взаимодействия  $\alpha,\beta$ -ненасыщенных кетонов, сульфидирующего агента и широкого набора диенофилов<sup>1-3</sup>.



$R_1 = \text{Ar}$ ;  $R, R_2 = \text{Alk}$ ,  $\text{Ar}$ ;  $X = \text{O}, \text{N-R}$

## Литература

1. Меркулова, Е.А., Колобов, А. В., Овчинников, К.Л. Патент 2670977 РФ, 2018
2. Меркулова, Е.А., Колобов, А.В., Овчинников, К.Л. Изв. АН, Сер. Хим. 2019, **68**, 606
3. Merkulova, E. A.; Kolobov, A. V.; Ovchinnikov, K. L.; Khrustalev, V. N.; Nenajdenko, V. G. Chem. Heterocycl. Compd. 2021, **57**, 245

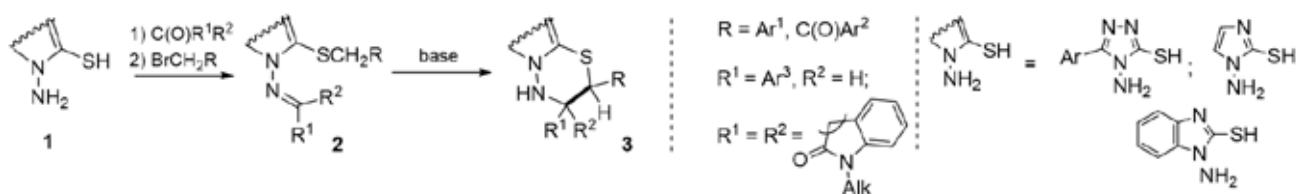
# ЦИКЛИЗАЦИЯ ОРТО-S-АЛКИЛ ЗАМЕЩЕННЫХ N-(ГЕТ) АРИЛХИНОНИМИНОВ

**Колодина А.А.,<sup>а</sup> Ходыкина Е.С.,<sup>а</sup> Стегленко Д.В.,<sup>а</sup> Демидов О.П.,<sup>б</sup> Метелица А.В.<sup>а</sup>**

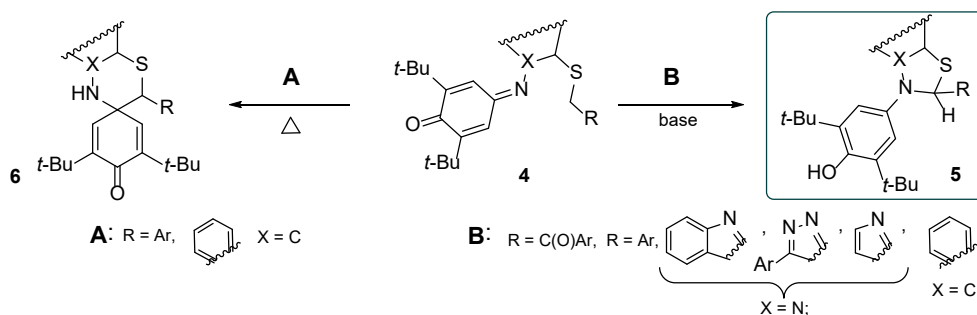
<sup>а</sup>Научно-исследовательский институт физической и органической химии  
Южного федерального университета, 344090, Ростов-на-Дону, проспект Стачки 194/2,  
e-mail: akolodina@sfnu.ru

<sup>б</sup>Северо-Кавказский федеральный университет, Химико-фармацевтический факультет, 355000,  
Ставрополь, улица Пушкина, 1/3

Предыдущие наши исследования показывают образование шестичленного цикла – триадиазина **3** при циклизации азометинных производных аминомеркаптоазолов **2** в основных условиях<sup>1,2</sup>.



В случаях циклизации производных хинониминов **4** в основных условиях наблюдается образование связи C-N с формированием триадиазольного цикла **5**. Образование триадиазинового цикла **6**, спиросопряженного с хиноновым фрагментом, происходит только при циклизации бензил производных N-арилхинониминов в термических условиях.



Проведенные квантово-химические расчеты B3LYP/6-31G\* в газовой фазе показывают, что циклизация анионной формы как S-бензильных, так и S-фенацильных производных хинониминов **4** должна приводить к формированию пятичленного цикла. В некоторых случаях такой процесс является фактически безбарьерным.

## Литература

1. Gaponenko N.I., Kolodina A.A., Lesin A.V., Kurbatov, S.V. *Russ. Chem. Bull.* 2012, **61**, 1154.
2. Kolodina A.A., Tsaturyan A.A., Galkina M.S., Borodkina I.G., Vetrova E.V., Demidov O.P., Berezhnaya A.G., Metelitsa A.V. *ChemistrySelect.* 2020, **5**, 12, 3586.

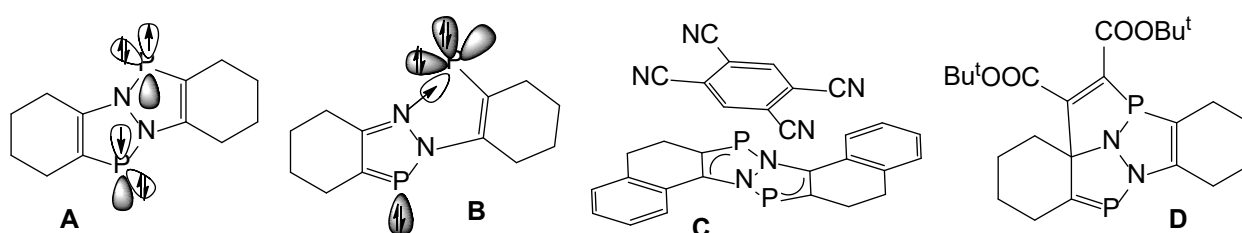
Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0852-2020-00-19).

# 3А,6А-ДИАЗА-1,4-ДИФОСФАПЕНТАЛЕНЫ: ГЕТЕРОЦИКЛЫ И ФОСФИНИДЕНЫ В ОДНОМ ФЛАКОНЕ

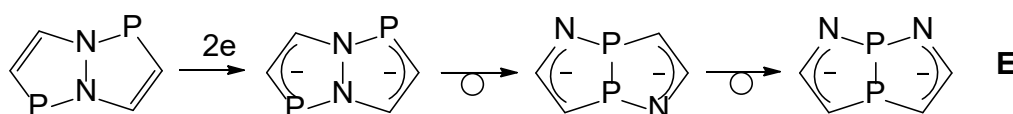
**Корнев А.Н., Панова Ю.С., Сущев В.В., Золотарева Н.В.**

*Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской академии наук,  
603137, Россия, г. Нижний Новгород, ул. Троицкая, д. 49.  
akornev@iomc.ras.ru*

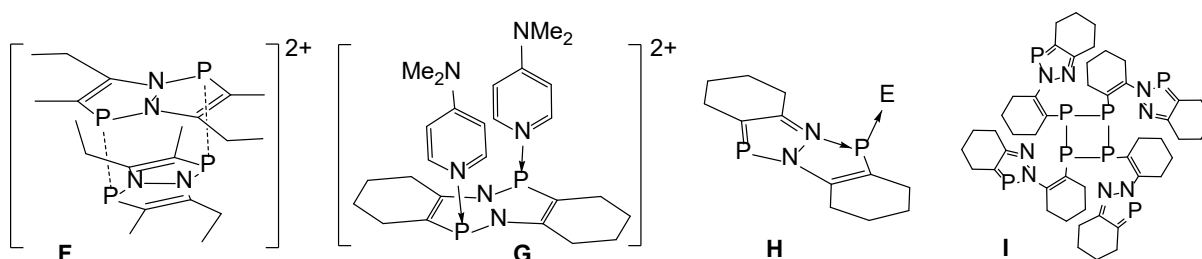
Уникальность свойств 3а,6а-диаза-1,4-дифосфапенталенов (DDP) состоит в том, что они одновременно являются и ароматическими гетероциклами (A) и стабилизированными фосфинидами (B)<sup>1</sup>. Свойства первых проявляются в образовании комплексов с переносом заряда с π-акцепторами (C), в реакциях циклоприсоединения (D),



трансannelирования и рециклизации (E),



в образовании комплексов дикатионного типа (F, G). Свойства DDP как стабилизированных (нуклеофильных) фосфиниденов становятся очевидными при их взаимодействии с электрофилами (H) (солями металлов, кислотами Льюиса, органичскими логенидами), а также из обратимых реакций олигомеризации (I).



## Литература

1. A.N. Kornev, Yu.S.Panova, et al, *Inorg. Chem.* **2019**, 58, 16144-16153.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-13-00400.*

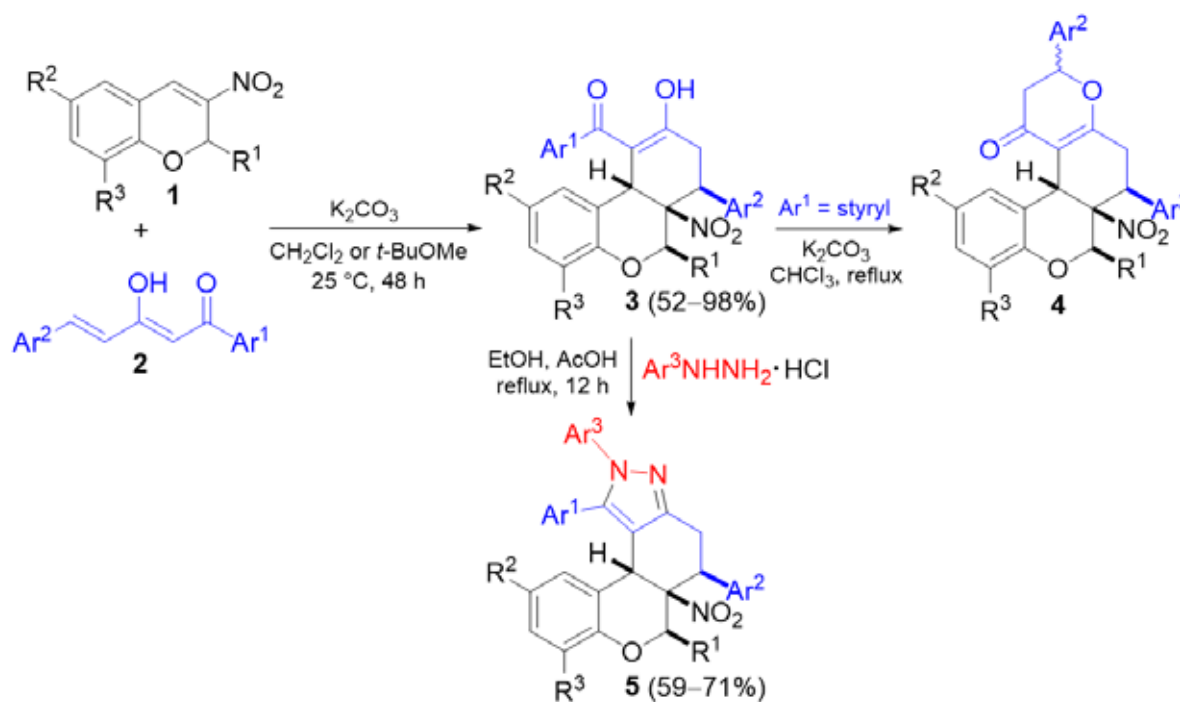


# [4+2] АННЕЛИРОВАНИЕ 2-ЗАМЕЩЕННЫХ 3-НИТРО-2H-ХРОМЕНОВ С 1,5-ДИ(ГЕТ)АРИЛПЕНТ-4-ЕН-1,3-ДИОНАМИ И КУРКУМИНОИДАМИ

**Коротаев В.Ю., Зимницкий Н.С., Кочнев И.А., Барков А.Ю.,  
Кутяшев И.Б., Сосновских В.Я.**

*Институт естественных наук и математики Уральского федерального университета им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620000, Екатеринбург, пр. Ленина 51,  
e-mail: korotaev.vladislav@urfu.ru*

Нуклеофильное присоединение (*E*)-1,5-ди(гет)арилпент-4-ен-1,3-дионов **2** по активированной двойной связи 2-трифторметил- и 2-фенилзамещенных 3-нитро-2*H*-хроменов **1** сопровождается внутримолекулярной циклизацией с образованием тетрагидро-6*H*-бензо[*c*]хроменов **3** в виде индивидуальных диастереомеров с *цис*-расположением заместителей R<sup>1</sup>, Ar<sup>2</sup> и нитрогруппы относительно конденсированной трициклической системы. В аналогичной реакции с участием куркуминоидов (Ar<sup>1</sup> = стирил) с высокими выходами образуются смеси хроманов **3** и гексагидро-1*H*,6*H*-хромено[6,5-*c*]хроменонов **4** в различном соотношении, которое можно контролировать условиями реакции.



R<sup>1</sup> = CF<sub>3</sub>, Ph; R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> = H, Me, MeO, EtO, Br, Cl, NO<sub>2</sub>; Ar<sup>1</sup>, Ar<sup>2</sup> = Ph, 4-MeOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 4-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 3,4-(MeO)<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>, 3,4,5-(MeO)<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>, 2-Furyl, 2-Thienyl, Styryl; Ar<sup>3</sup> = Ph, 4-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>

Обработкой продуктов **3** гидрохлоридами арилгидразинов при кипячении в смеси этанола с уксусной кислотой получены конденсированные пиразолы **5**.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 20-03-00716) и в рамках государственного задания Минобрнауки РФ (проект FEUZ-2020-0052).*

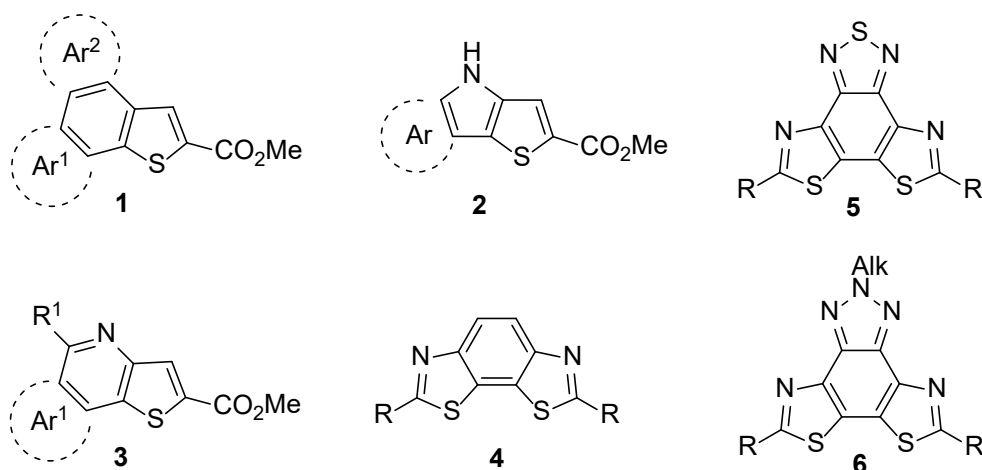
# ФОТОХИМИЧЕСКАЯ ЦИКЛИЗАЦИЯ КАК КЛЮЧЕВОЙ ПОДХОД К РАЦИОНАЛЬНОМУ ДИЗАЙНУ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИОФЕНА И 1,3-ТИАЗОЛА

Костюченко А.С.,<sup>а,б</sup> Ульянкин Е.Б.,<sup>а,б</sup> Фисюк А.С.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>ФГБОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского»,  
644077, Омск, пр. Мира, 55а,  
e-mail: kostyuchenko@chemomsu.ru

<sup>б</sup>ФГБОУ ВО «Омский государственный технический университет», 644050, Омск, пр. Мира, 11

Интерес к конденсированным производные тиофена и 1,3-тиазола обусловлен их уникальными электронными и фотофизическими свойствами. Они находят широкое применение в органической электронике, в качестве материалов для LEDs, тонкопленочных транзисторов, солнечных батарей.<sup>1,2,3</sup>



Предложены новые методы синтеза конденсированных систем **1-6**, исключающие использования палладий катализируемые реакции кросс-сочетания.<sup>4</sup> Во всех случаях реакция фотоциклизации являлась ключевой стадией синтеза. Изучена зависимость фотофизических и электрохимических свойств полученных соединений **1-6** от их строения.

## Литература

1. Verbitskiy, E.V.; Rusinov, G.L.; Charushin, V.N. *Arkivoc*, 2017, **1**, 356.
2. Kostyuchenko A.S., Kurowska A., Zassowski P., Zheleznova T.Yu., Ulyankin E.B., Domagala W., Pron A., Fisyuk A.S. *J. Org. Chem.* 2019, **84**, 10040.
3. Murphy A.R., Frechet J.M. *J. Chem. Rev.* 2007, **107**, 1066.
4. Ulyankin E.B., Kostyuchenko A.S., Chernenko S.A., Bystrushkin M.O., Samsonenko A.L., Shatsauskas A.L., Fisyuk A.S. *Synthesis.*, 2021, **52**, doi: 10.1055/a-1416-4924.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-73-10043.

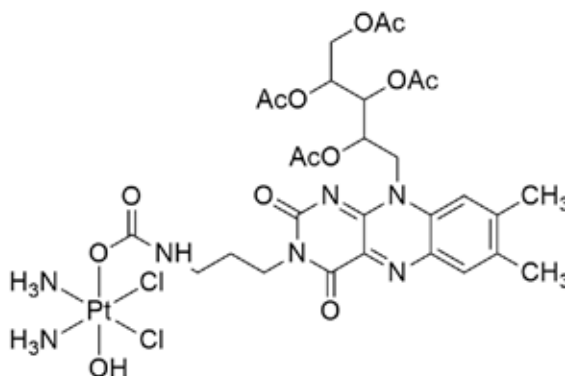
## ПРОЛЕКАРСТВА РТ (IV) ДЛЯ ТЕРАПИИ ЗЛОКАЧЕСТВЕННЫХ НОВООБРАЗОВАНИЙ

**Красновская О.О.,** Спектор Д.В., Павлов К.Г., Акасов Р.А., Скворцов Д.А.,  
Костюков А.А., Кузьмин В.А., Ванеев А.Н., Ерофеев А.С., Горелкин П.В.,  
Штиль А.А., Белоглазкина Е.К., Мажуга А.Г.

*МГУ им М. В. Ломоносова, Химический факультет, Ленинские горы, д.1. стр.3, 119991, Москва, Россия  
Krasnovskaya@gmail.com*

Одним из наиболее перспективных подходов к повышению эффективности лекарственных средств является создание пролекарств Pt(IV), способных эффективно проникать в клетки опухоли за счет повышенной липофильности и переходить в комплексы Pt(II) под воздействием внутриклеточных редуктаз. Варьирование природы аксиальных лигандов пролекарств Pt(IV) позволяет тонко настраивать фармакологическую активность разрабатываемых терапевтических средств.

В настоящей работе разработаны пролекарства Pt(IV) с аксиальными лигандами различной природы, представляющие собой эффективные противоопухолевые препараты, способные преодолевать лекарственную устойчивость и эффективно накапливаться в злокачественных новообразованиях; также, путем конъюгации препаратов Pt(II) с фотопоглотителями разработаны пролекарства Pt(IV), представляющих собой агенты для фотодинамической терапии, способные контролируемо высвобождать цисплатин под действием синего света (450 нм).



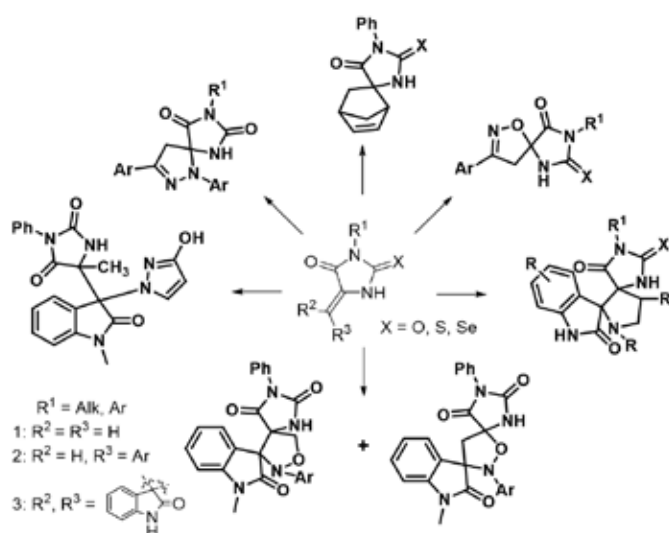
*Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 19-74-10059.*

# ИССЛЕДОВАНИЕ АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ ГИДАНТОИНОВ, ТИО- И СЕЛЕНОГИДАНТОИНОВ В РЕАКЦИЯХ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

Кукушкин М.Е., Шибанов Д.Е., Новоторцев В.К., Филькина М.Е., Жуков Е.А., Белоглазкина Е.К.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, 119992, г. Москва, ГСП-2, Ленинские горы, д.1, стр. 3  
e-mail: kukmevg@gmail.com

Важным фактором при разработке лекарственных препаратов является ограничение конформационной подвижности синтезируемых молекул, что позволяет зафиксировать требуемое пространственное положение важных заместителей. С этой точки зрения, значительный интерес представляют органические молекулы, содержащие спиросопряжение двух или более карбо- или гетероциклов.



Для производных тетрагидро-4Н-имидазол-4-онов (гидантоинов и их аналогов) были доказаны антибактериальные, противосудорожные, антиаритмические и другие свойства, что делает их важными объектами в исследованиях биологической активности. Посредством [3+2]-циклоприсоединения азометинилидов, азометиниминов, нитриллиминов, нитрилоксидов и нитронов, а также реакции Дильса-Альдера к производным гидантоинов, содержащих экзоциклическую двойную связь в 5-м положении гетероцикла, была получена серия различных классов спиросоединений.

## Литература

- Ivanenkov, Y. A., Kukushkin, M. E., et al. *Bioorganic Med. Chem.* **2016**, 24(4), 802–811.
- Ivanenkov, Y. A., Kukushkin, M. E., et al., *Bioorganic Med. Chem.Lett.* **2015**, 25(2), 404–409.
- Kukushkin, M. E., et al. Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements. **2020**, 195(7), 544–555.
- Novotortsev V.K., Kukushkin M.E., *International Journal of Molecular Sciences.* **2021**, 22(5), 2613-2638.
- Shybanov D.E., Kukushkin M.E., et al. *Mendeleev Communications*, **2021**, 31(2), 246-247

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-73-00234.

# ДИЗАЙН НОВЫХ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СОЛЕЙ НА ОСНОВЕ 1,2,4-ТРИАЗОЛИЛФУРОКСАНОВ

**Ларин А.А.**,<sup>a</sup> **Муравьев Н.В.**,<sup>b</sup> **Ферштат Л.Л.**,<sup>a</sup> **Махова Н.Н.**<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ФГБУН Институт Органической Химии им. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47  
e-mail: roby3@mail.ru

<sup>b</sup> ФГБУН ФИЦ Институт Химической Физики им. Семенова Российской Академии Наук,  
119991, Москва, ул. Косыгина 4

В течение последних нескольких десятилетий поиск новых энергетических структур был сосредоточен на материалах с высокой плотностью энергии, которые построены на основе различных азотно-кислородных и богатых азотом гетероциклов, таких как оксадиазолы, триазолы и т.д. Такие ансамбли должны обладать высокой положительной энтальпией образования, хорошей термостабильностью и экологичностью.<sup>1</sup>

В настоящей работе нами предложен эффективный подход к синтезу различных полиазотных энергоемких солей 1,2,4-триазолилфуроксанов **5-16**. Этот подход включает в себя синтез амидразонов **2a,b** из доступных цианофуроксанов **1a,b** с нитрильным и аزيدным заместителями. Затем, на основе конденсации полученных амидразонов с бромцианом были получены свободные 1,2,4-триазолилфуроксаны **3a,b**. Далее на основе *one-pot* реакции метатезиса протон в NH-положении замещается на различные полиазотные катионы через промежуточное образование серебряных солей **4a,b**<sup>2</sup>.

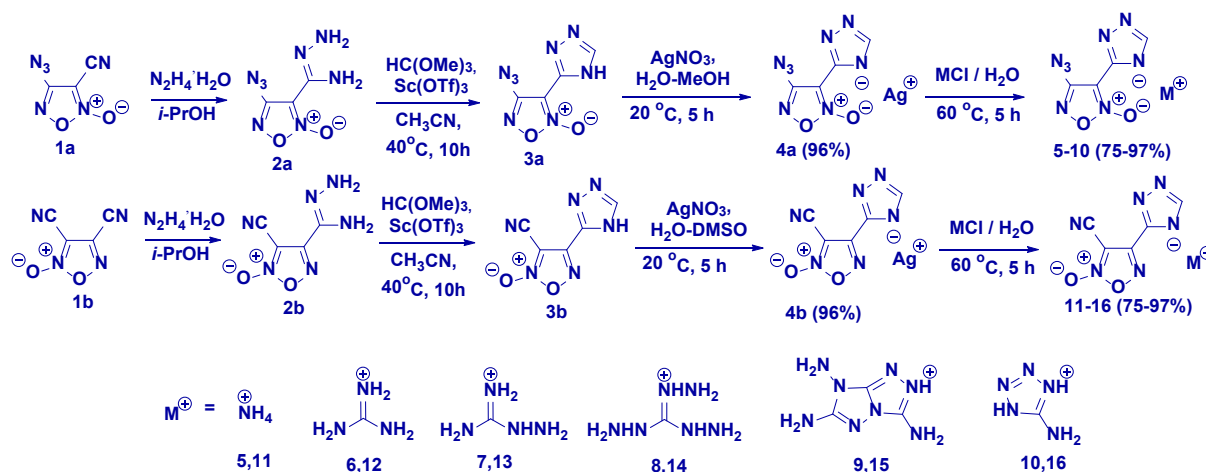


Рисунок 1. Синтез солей 1,2,4-триазолилфуроксанов с высокоазотными анионами.

## Литература

1. H. Wei, C. He, J. Zhang, J. M. Shreeve, *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2015, **54**, 9367–9371.
2. A. A. Larin, N. V. Muravyev, A. N. Pivkina, K. Yu. Suponitsky, I. V. Ananyev, D. V. Khakimov, L. L. Fershtat, N. N. Makhova, *Chem. Eur. J.* 2019, **25**, 4225–4233.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-20074.

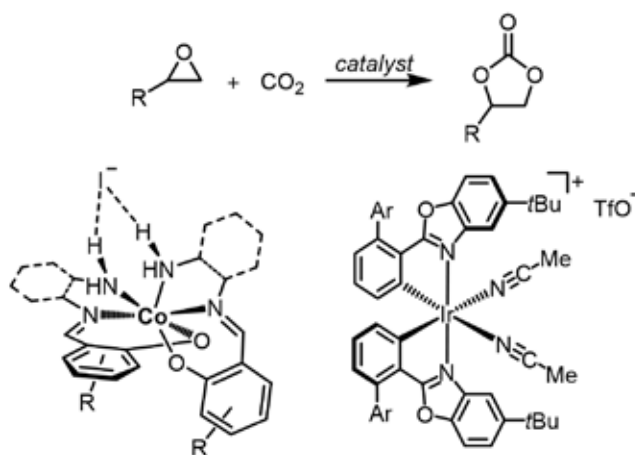
# НОВЫЕ КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ ФИКСАЦИИ CO<sub>2</sub> В ЦИКЛИЧЕСКИЕ КАРБОНАТЫ

**Ларионов В.А.,<sup>а,б</sup> Емельянов М.А.,<sup>а</sup> Э. Меггерс,<sup>б</sup> Белоконь Ю.Н.,<sup>а</sup> Малеев В.И.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup>Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук,  
119991, Москва, ул. Вавилова 28,  
e-mail: larionov@ineos.ac.ru

<sup>б</sup>Марбургский университет им. Филиппа, 35043, Марбург, ул. Ханса-Меервайна 4, Германия

Избыточное содержание углекислого газа (CO<sub>2</sub>) в атмосфере вызывает парниковый эффект, и поэтому его трансформация в ценные органические материалы является одной из приоритетнейших задач химии<sup>1</sup>. В частности, реакция эпоксидов с CO<sub>2</sub> с образованием практически важных циклических карбонатов привлекает большое внимание, т.к. полученные продукты востребованы в различных отраслях промышленности.



В данной работе мы разработали новые гомогенные каталитические системы на основе хиральных октаэдрических комплексов Co(III)<sup>2-3</sup> и бис-циклометаллированных комплексов с хиральностью на иридие<sup>4</sup> для фиксации CO<sub>2</sub> в циклические карбонаты.

## Литература

1. Comerford J.W., Ingram I.D.V., North M., Wu X. *Green Chem.*, 2015, **17**, 1966.
2. Rulev Y.A., Larionov V.A., Lokutova A.V., Moskalenko M.A., Lependina O.L., Maleev V.I., North M., Belokon Y.N. *ChemSusChem*, 2016, **9**, 216.
3. Emelyanov M.A., Stoletova N.V., Lisov A.A., Medvedev M.G., Smol'yakov A.F., Maleev V.I., Larionov V.A. *Inorg. Chem. Front.*, 2021, DOI: 10.1039/D1QI00464F.
4. Qin J., Larionov V.A., Harms K., Meggers E. *ChemSusChem*, 2019, **12**, 320.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ, проект № 20-13-00155.

# КАРБИД КАЛЬЦИЯ В СИНТЕЗЕ МЕЧЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

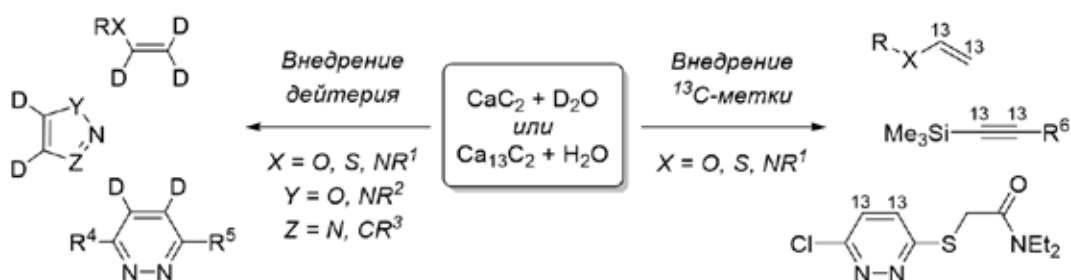
**Ледовская М.С.,<sup>а</sup> Воронин В.В.,<sup>а</sup> Родыгин К.С.,<sup>а</sup> Анаников В.П.<sup>а,б</sup>**

<sup>а</sup>Институт химии СПбГУ, 198504, Санкт-Петербург, Университетский проспект 26, e-mail: maria.s.ledovskaya@gmail.com

<sup>б</sup>ИОХ РАН им. Зелинского, 119991, Москва, Ленинский проспект 47

Карбид кальция – очень перспективное соединение для органического синтеза. Сам по себе он достаточно инертен, но, реагируя с водой, превращается в ацетилен, который может вступать в различные химические реакции. На основе генерируемого из карбида кальция ацетилена были получены виниловые производные, алкины, пирролы, пиразолы, изоксазолы, бензофураны и другие органические соединения.<sup>1-6</sup>

Мы предлагаем использовать карбид кальция для синтеза D- и <sup>13</sup>C-меченных соединений: заменяя воду на D<sub>2</sub>O (в реакции с CaC<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O), можно получить дейтерированные продукты; из смеси Ca<sup>13</sup>C<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O, образуются <sup>13</sup>C<sub>2</sub>-меченные соединения. На основе этих идей нами был синтезирован ряд дейтерированных и <sup>13</sup>C<sub>2</sub>-меченных виниловых производных,<sup>2,3</sup> дейтерированные пиразолы,<sup>4</sup> изоксазолы,<sup>5</sup> триазолы и пиридазины, <sup>13</sup>C<sub>2</sub>-алкины и внедрена <sup>13</sup>C<sub>2</sub>-метка в молекулу применяемого для лечения заболеваний желудочно-кишечного тракта азинтамида.<sup>2</sup>



## Литература

- Rodygin K.S., Ledovskaya M.S., Voronin V.V., Lotsman K.A., Ananikov V.P. *Eur. J. Org. Chem.*, 2021, **2021**, 43.
- Ledovskaya M.S., Voronin V.V., Rodygin K.S., Ananikov V.P., *Org. Chem. Front.*, 2020, **7**, 638.
- Ledovskaya M.S., Voronin V.V., Rodygin K.S., Posvyatenko A.V., Egorova K.S., Ananikov V.P. *Synthesis*, 2019, **51**, 3001.
- Voronin V.V., Ledovskaya M.S., Gordeev E.G., Rodygin K.S., Ananikov V.P. *J. Org. Chem.*, 2018, **83**, 3819.
- Ledovskaya M.S., Rodygin K.S., Ananikov V.P. *Org. Chem. Front.*, 2018, **5**, 226.
- Voronin V.V., Ledovskaya M.S., Rodygin K.S., Ananikov V.P. *Org. Chem. Front.*, 2020, **7**, 1334.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-73-10032.



# НОВЫЕ ЛИНЕЙНЫЕ И МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ДИАМИДЫ 1,10-ФЕНАНТРОЛИН-2,9-ДИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ: СИНТЕЗ, КООРДИНАЦИОННАЯ ХИМИЯ И ЭКСТРАКЦИОННЫЕ СВОЙСТВА

**Лемпорт П.С., Матвеев П.И., Петров В.С., Евсюнина М.В., Лексина У.М., Ненайденко В.Г.**

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3.  
e-mail: lemport.pavel@yandex.ru*

Атомная энергетика является одним из наиболее перспективных способов генерации энергии.<sup>1</sup> Разработка высокоселективных экстрагентов<sup>2</sup> для жидкостной экстракции направлена на решение проблемы утилизации опасных радионуклидов, образующихся при переработке ядерного топлива.

Диамиды 1,10-фенантролин-2,9-дикарбонической кислоты демонстрируют высокие значения коэффициентов селективности для разделения актинидов и лантанидов.<sup>2,3</sup>

Ранее мы показали, что строение и объём заместителей при амидных атомах азота может играть ключевую роль в настройке экстракционных свойств синтезируемых диамидов 1,10-фенантролин-2,9-дикарбонической кислоты.<sup>4</sup>

Мы продолжили молекулярный дизайн новых фенантролиндиамидов, изучили их координационную химию на примере некоторых f-элементов и обнаружили ещё более эффективные экстрагенты для разделения лантанидов и актинидов. Также полученные знания позволили нам создать принципиально новые макроциклические фенантролиндиамиды (рис.1).

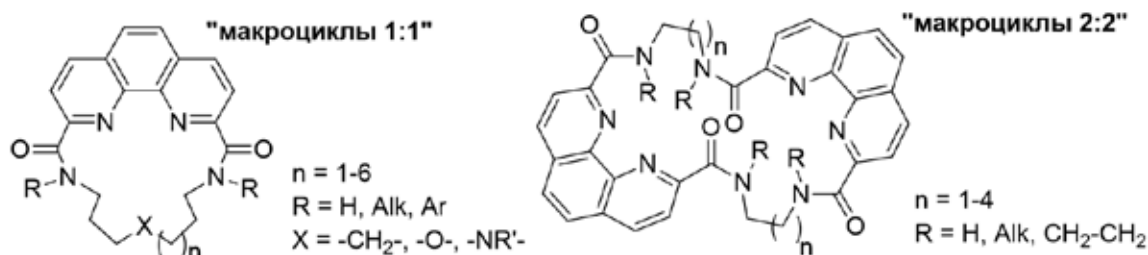


Рисунок 1. Общие структурные формулы первых макроциклических фенантролиндиамидов.

Некоторые представители полученных фенантролиндиамидных макроциклов обнаруживают ценные экстракционные и фотофизические свойства.

## Литература

1. OECD/NEA, The Role of Nuclear Energy in a Low-carbon Energy Future, Paris, 2012, **6887**.
2. Leoncini A., Huskens J., Verboom W. *Chem. Soc. Rev.*, 2017, **46**, 7229.
3. Dehaut J., Williams N. J., Shkrob I. A., Luo H., Dai S. *Dalton Trans.*, 2016, **45**, 11624.
4. Lemport P. S. et al. *RSC Adv.*, 2020, **10**, 26022.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 21-73-10067.*

# РАЗРАБОТКА И СИНТЕЗ НОВЫХ СОПРЯЖЕННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНОГО СТРОЕНИЯ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

Луносов Ю.Н., Балакирев Д.О., Солодухин А.Н., Дядищев И.В.,  
Калиниченко Н.К., Пономаренко С.А.

*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук,  
117393, Москва, Профсоюзная улица, 70,  
e-mail: luponosov@ispm.ru*

Донорно-акцепторные (Д-А) сопряженные молекулы представляют огромный интерес, т.к. свойства таких соединений могут быть настроены не только заменой типа донорного или акцепторного фрагмента, но и длиной и природой сопряженного спейсера между ними. В докладе будет представлен синтез и исследование оптических, электрохимических и термических свойств новых Д-А молекул, имеющих в качестве электронодонорного фрагмента различные конденсированные фрагменты, например, такие как бензодитиофен, бензотрииндол и производные акридина, в качестве сопряженного спейсера тиофеновые или тиенотиофеновые звенья, а в качестве концевых электроноакцепторных фрагментов различные производные дициановинильных, цианоацетатных и цианоинданоновых групп. Полученные соединения обладают рядом ценных свойств и могут быть использованы в качестве фотоактивного слоя органических солнечных батарей<sup>1-3</sup>, люминофоров,<sup>4</sup> электролюминесцентных материалов светоизлучающих диодов<sup>5</sup> или дырочно-транспортных слоев для перовскитных СБ.

## *Литература*

1. Yu. N. Luponosov, A. N. Solodukhin, A. L. Mannanov, V. A. Trukhanov, S. M. Peregudova, S. A. Pisarev, A. V. Bakirov, M. A. Shcherbina, S. N. Chvalun, D. Yu. Paraschuk, S. A. Ponomarenko, *Organic Electronics*, 2017, **51**, 180
2. Yu. N. Luponosov, A. N. Solodukhin, A.L. Mannanov, P. S. Savchenko, Yury Minenkov, D. Yu. Paraschuk, S. A. Ponomarenko, *Dyes and Pigments*, 2020, **177**, 108260
3. Balakirev D.O., Luponosov Yu.N., Mannanov A.L., Savchenko P.S., Minenkov Y., Paraschuk D.Yu., Ponomarenko S.A. *Dyes and Pigments*, 2020, **181**, 108523.
4. C.Y. Chang, A.N. Solodukhin, S.Y. Liao, K.P.O. Mahesh, C.L. Hsu, S.A. Ponomarenko, Yu. N. Luponosov, Yu-C. Chao, *Journal of Materials Chemistry C*, 2019, **7**, 8634
5. B. A. L. Raul, Yu. N. Luponosov, W. Yan, N. M. Surin, O. Douhéret, J. Min, T. L.C. Jansen, S. A. Ponomarenko, M.S. Pshenichnikov, *Scientific Reports*, 2020, **10**, 2119

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ №19-73-10198.*

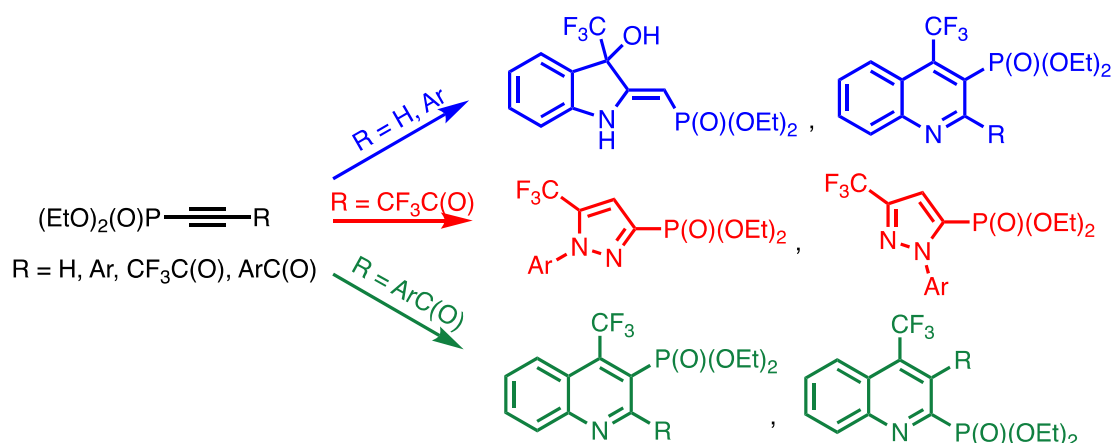
# РЕГИОДИВЕРГЕНТНЫЙ СИНТЕЗ ТРИФТОРМЕТИЛЗАМЕЩЕННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ ФОСФОНАТОВ

**Митрофанов А.Ю., Бычкова В.А., Белецкая И.П.**

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет,  
119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 3,  
e-mail: oksazol@gmail.com

Фосфоновые кислоты и их производные находят широкое применение в медицинской химии, агрохимии, химии материалов, координационной химии<sup>1,2</sup>. Известно, что введение атома фтора или перфторалкильных фрагментов в молекулы биологически активных органических соединений значительно изменяет их физико-химические свойства, делая их более биодоступными, липофильными и метаболически стабильными<sup>3</sup>. В связи с этим, разработка подходов к синтезу соединений, содержащих и фосфорильную, и трифторметильную группы представляет собой актуальную задачу.

В данной работе мы продемонстрировали возможность региодивергентного синтеза различных CF<sub>3</sub>- и P(O)(OEt)<sub>2</sub>-замещенных гетероциклических соединений (индолинов, хинолинов<sup>4</sup> и пиразолов) на примере реакций азотсодержащих нуклеофилов с диэтил алк-1-ин-1-илфосфонатами.



## Литература

1. Queffelec C., Petit M., Janvier P., Knight D.A., Bujoli B., *Chem. Rev.* 2012, **112**, 3777.
2. Chen L., Liu X.-Y., Zou Y.-X., *Adv. Synth. Catal.* 2020, **362**, 1724.
3. Berger R., Resnati G., Metrangolo P., Hulliger J. *Chem. Soc. Rev.*, 2011, **40**, 3496.
4. Mitrofanov A.Y., Bychkova V.A., Nefedov S.E., Beletskaya I.P. *J. Org. Chem.*, 2020, **85**, 14507.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-73-00147.

# ФТОРИРОВАННЫЕ АЛКЕНЫ И АЦЕТИЛЕНЫ В СИНТЕЗЕ ПРАКТИЧЕСКИ ВАЖНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

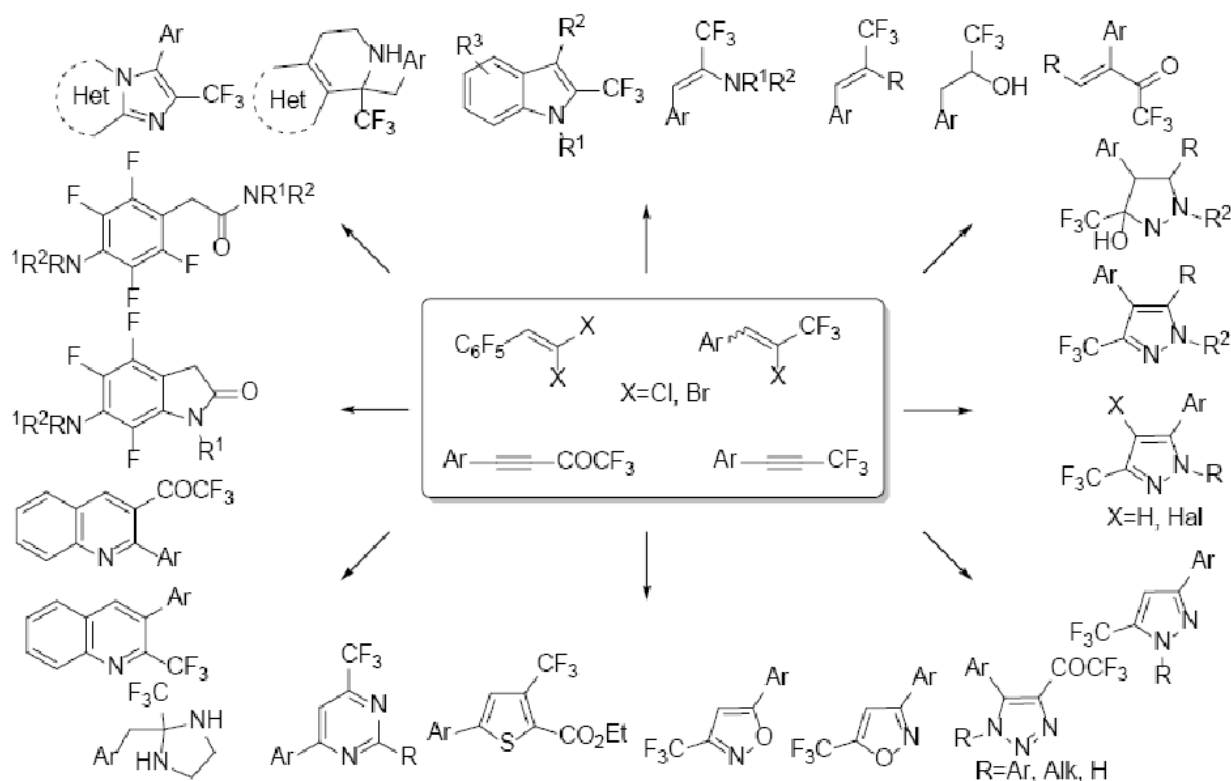
Музалевский В.М., Ненайденко В.Г.

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,  
 119992, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3  
 e-mail: muzvas@mail.ru

Поиск новых подходов к синтезу фторированных соединений – одна из приоритетных задач современной органической химии, поскольку многие фторорганические соединения проявляют физиологическую активность и применяются в качестве лекарств. Так, среди вновь выводимых на рынок лекарств примерно 25-30% содержат по крайней мере один атом фтора. Кроме того, фторированные соединения находят широкое применение в качестве гербицидов, пестицидов, компонентов для лазерной техники, жидких кристаллов и конструкционных материалов.

Методы прямого фторирования не всегда селективны, и часто используют дорогостоящие реагенты. Как следствие, сборка фторированных соединений из молекул, уже содержащих фтор, стала доминирующей стратегией их синтеза.

Функционально замещенные фторированные алкены и ацетилены прекрасные строительные блоки для направленного синтеза фторированных соединений с заданным положением фтора или фторированного фрагмента. Используя данные соединения, мы успешно синтезировали широкий круг фторированных молекул, перспективных для медицинской химии.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 18-13-00136.

# СИНТЕЗ, РЕАКЦИИ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ СЕРОЗАМЕЩЕННЫХ ТЕТРАЗОЛОВ

**Мызников Л.В.**

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),  
190013, СПб, Московский пр. 26  
e-mail: myznikov\_lv@mail.ru

Активное развитие химии серозамещенных тетразолов в последние несколько десятков лет происходит благодаря расширению областей применения этих соединений. Одновременно растет потребность в новых методах синтеза и функционализации этих соединений.<sup>1</sup> В докладе рассмотрены достижения и в химии серозамещенных тетразолов.

Наиболее эффективная сегодня методология синтеза монозамещенных тиотетразолов основана на применении  $ZnCl_2$  в качестве катализаторов циклоприсоединения азидов к тиоцианатам и изотиоцианатам.<sup>2,3</sup> Мы нашли, что  $ZnCl_2$  является катализатором межфазного переноса и катализатором циклоприсоединения азидов к указанным субстратам.



Среди монозамещенных тетразолов наиболее активно развивается химия 1-замещенных тетразол-5-тиолов, за последние годы предложен ряд новых методов их функционализации.<sup>1,4,5</sup> Кроме того, нами показано, что 1-замещенные тетразол-5-тиолы и 5-сульфанилтетразолы являются ценными субстратами для получения тетразолов с различными заместителями, в том числе 1-замещенных тетразолов, 1-замещенных 5-бромтетразолов и 2-замещенных тетразол-5-тиолов.

Значительный интерес представляет биологическая активность серозамещенных тетразолов. В ряду этих соединений нами обнаружены вещества обладающие мощным антиоксидантным и антигипоксантным действием.

## Литература

1. Myznikov L.V., Vorona S.V., Artamonova T.V., Zevatskii Y.E. *Russ. Chem. Bull.*, 2016, **65**, 923.
2. Vorona S. V., Myznikov L. V., Artamonova T.V., Zevatskii Yu.E. *Synthesis*, 2014, **46**, 781.
3. Vorona S.V., Zevatskii Y.E., Myznikov L.V. *ChemistrySelect*, 2019, **4**, 10846.
4. Melnikova Yu.V., Lyakhov A.S., Ivashkevich L.S., Artamonova T. V., Zevatskii Yu.E., Myznikov L.V. *Rus. J. Gen. Chem.*, 2016, **86**, 312.
5. Melnikova I., Roh J., Kunes J., Artamonova T., Zevatskii Y., Myznikov L. *Tetrahedron Lett.*, 2017, **58**, 3842.

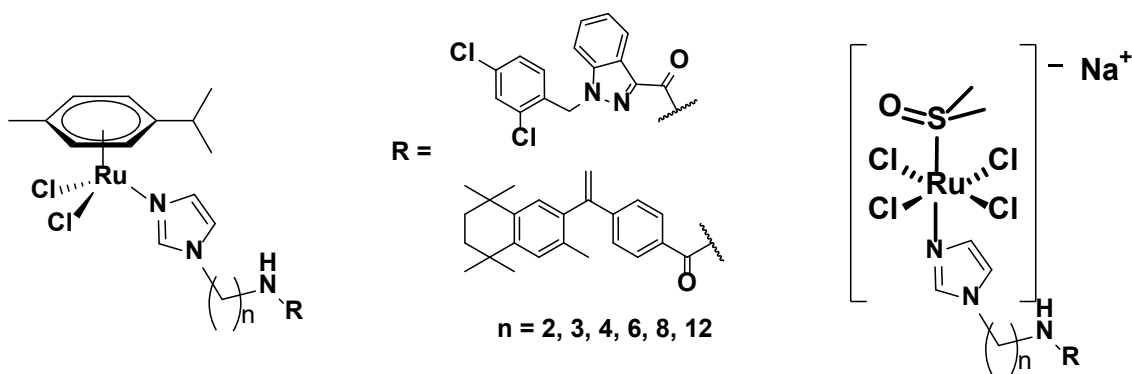
# ПРОТИВООПУХОЛЕВЫЕ КОМПЛЕКСЫ РУТЕНИЯ С ЛИГАНДАМИ НА ОСНОВЕ ЛОНИДАМИНА И БЕКСАРОТЕНА

**Назаров А.А., Шутков И.А., Гончар М.Р., Антоненц А.А., Милаева Е.Р.**

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, кафедра медицинской химии и тонкого органического синтеза. 119991, Москва, Ленинские горы 1 стр. 3,  
e-mail: nazarov@med.chem.msu.ru

Платиновые лекарственные препараты являются высокоэффективными химиотерапевтическими средствами при злокачественных новообразованиях, однако их недостаточная селективность и большое количество побочных эффектов затрудняют использование этих соединений. Современный дизайн высокоэффективных соединений с противоопухолевым эффектом ведется путем направленной модификации с целью повышения селективности и уменьшения общей токсичности. Одним из передовых подходов является создание лекарств состоящих из двух активных функциональных фрагментов способных воздействовать одновременно на различные мишени.

Нами были предложен новый подход к получению инновационных противоопухолевых средств, заключающийся в комбинации в одной молекуле атомов Ru(III) и Ru(II) и мишень-ориентированных лигандов (лонидамин: селективный ингибитор гликолиза и бексаротен: агонист ретинойдного X рецептора) модифицированных имидазольным фрагментом, которые воздействуют на клеточные механизмы специфичные для злокачественных опухолей. Новые соединения проявляют высокую активность против раковых клеточных культур в экспериментах *in vitro*. Выявлены соединения лидеры комплексов Ru(III) и Ru(II).



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-13-00084 и РФФИ, проект № 19-53-26002.

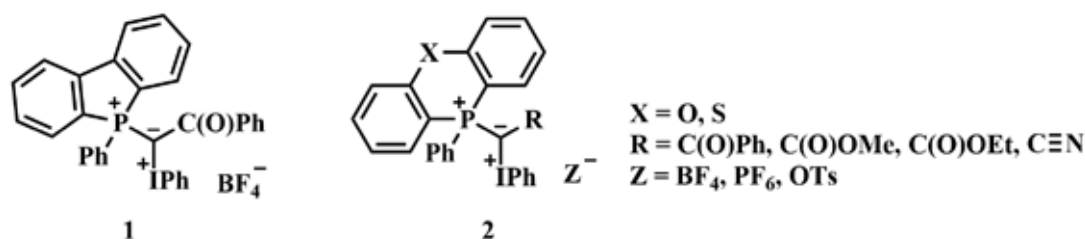
# НОВЫЕ ФОСФОНИЕВО-ИОДОНИЕВЫЕ ИЛИДЫ НА ОСНОВЕ ЦИКЛИЧЕСКИХ ФОСФИНОВ: СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

Ненашев А.С., Доспехов Д.А., Подругина Т.А.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 3,  
e-mail: anton.nenashev@chemistry.msu.ru

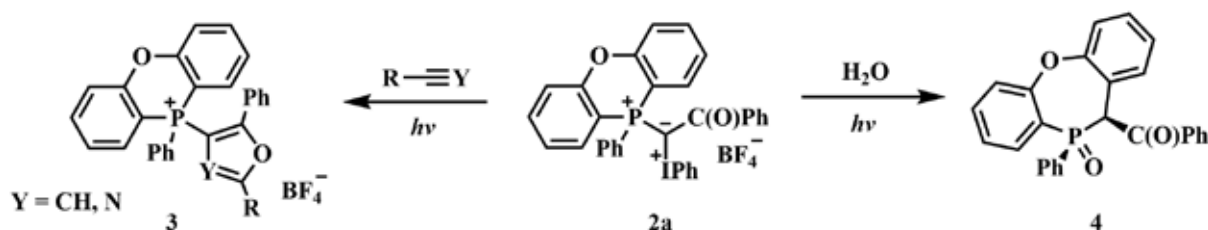
Использование смешанных фосфониево-иодониевых илидов в фотохимической реакции с алкинами и нитрилами открыло путь к необычным фосфорсодержащим гетероциклическим системам на основе фосфинолина, а также фосфонийзамещенным фуранам и оксазолам.<sup>1</sup>

Ранее мы показали принципиальную возможность использования циклического феноксафосфина как синтона для создания смешанного илида.<sup>2</sup> В настоящем исследовании был разработан синтетический подход к новому структурному типу смешанных илидов, который уже содержит циклический фосфониевый фрагмент. Синтезирована серия илидов на основе дибензофосфола **1**, феноксафосфина и фенотиафосфина **2**.



На примере илидов **2**, содержащих феноксафосфониевый узел ( $X = O$ ), была показана возможность фотохимической реакции с алкинами и нитрилами, продуктами которой являются фураны и оксазолы **3**.

Для смешанных илидов открыт новый процесс при УФ-облучении в присутствии влаги, сопровождающийся расширением фосфацикла и приводящий к уникальным феноксафосфепиновым системам **4**.



## Литература

- Matveeva E.D., Podrugina T.A., Taranova M.A., Vinogradov D.S., Gleiter R., Zefirov N.S. *J. Org. Chem.*, 2013, **78**, 23, 11691.
- Ненашев А.С., Виноградов Д.С., Миронов А.В., Подругина Т.А. *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2020, **69**, 12, 2333.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 121021000105-7.



# МЕХАНИЗМЫ РЕАКЦИЙ ЭЛЕКТРОФИЛЬНОГО, НУКЛЕОФИЛЬНОГО, РАДИКАЛЬНОГО ПРИСОЕДИНЕНИЯ-ОТЩЕПЛЕНИЯ В СИНТЕЗАХ РЯДОВ N-,O-,S-СОЕДИНЕНИЙ: БЕНЗОЛА, ФУРАНА, ТИОФЕНА, ОКСАЗОЛИНА, ОКСАЗОЛА, ОКСАДИАЗОЛА, ПИРИДИНА В ОСНОВНОМ И СПЕКТРОСКОПИЯ ПОЛНЫХ СПЕКТРОВ ЭЛЕКТРОННЫХ СИНГЛЕТНЫХ, ТРИПЛЕТНЫХ, КВАРТЕТНЫХ, ДУБЛЕТНЫХ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ПРИ РАЗНЫХ PH

Обухов А.Е.

ФАНУ 25 ГосНИИ химмотологии Минобороны России,  
 121467, Молодогвардейская, 10  
 aobukhov@fo.gpi.ru

Разработан спектрально-квантовохимический метод классификации N-,O-,S-гетероциклических соединений углеводов по типам симметрии в основном и орбитальной природе многоступенчатых переходов и механизмы дезактивации полных спектров электронных возбужденных состояний ( $S_i T_j D_n Q_m$  ЭВС, рис 1а) разной орбитальной природы с целью направленного получения производных: бензола, фурана, тиафена, оксазолинов, оксазолов, оксадиазолов, пиридинов с заданной пространственной и электронной структурой (Рис. 1б) по спектральной сверхтонкой структуре спектров: флюоресценции (500-77-2,6 К) при Уф-лазерной накачки и ЯМР, ЭПР, УФ-, ИК-, КР-Рамана.<sup>[1]</sup>

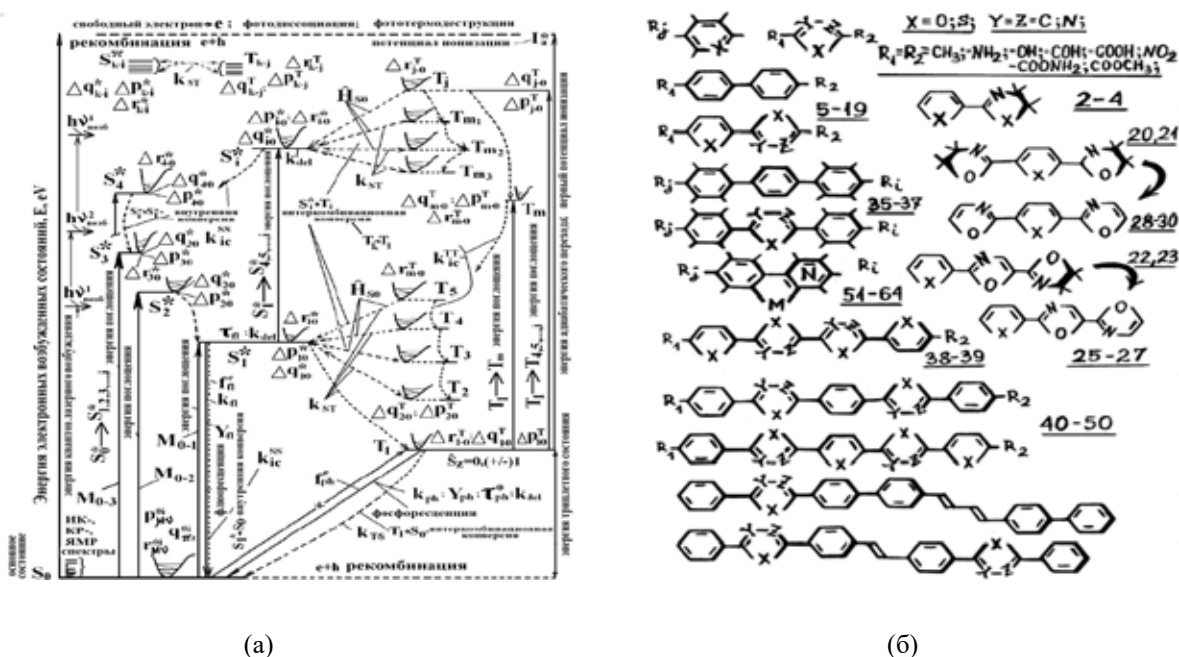


Рис. 1(а). Полная схема частот и сил осцилляторов безизлучательных переходов в полных спектрах  $S_i T_j D_n Q_m$  ЭВС (дублет  $D_n^*$  и квинтет  $Q_m^*$ ), при перепоглощении  $S_1^* \rightarrow S_1^*$  и  $T_1 \rightarrow T_1$  энергии накачки до акта испускания фотонов, рассчитанная методами ЛКАО-МО ССП расширенное-КВ ЧПДП/С (spd-базис). (б) Соединения.

Литература:

[1] Обухов А.Е. Спектроскопия основного и возбужденных состояний многоатомных соединений в разных условиях. - М.: "Спутник+". 2010. - 274с.

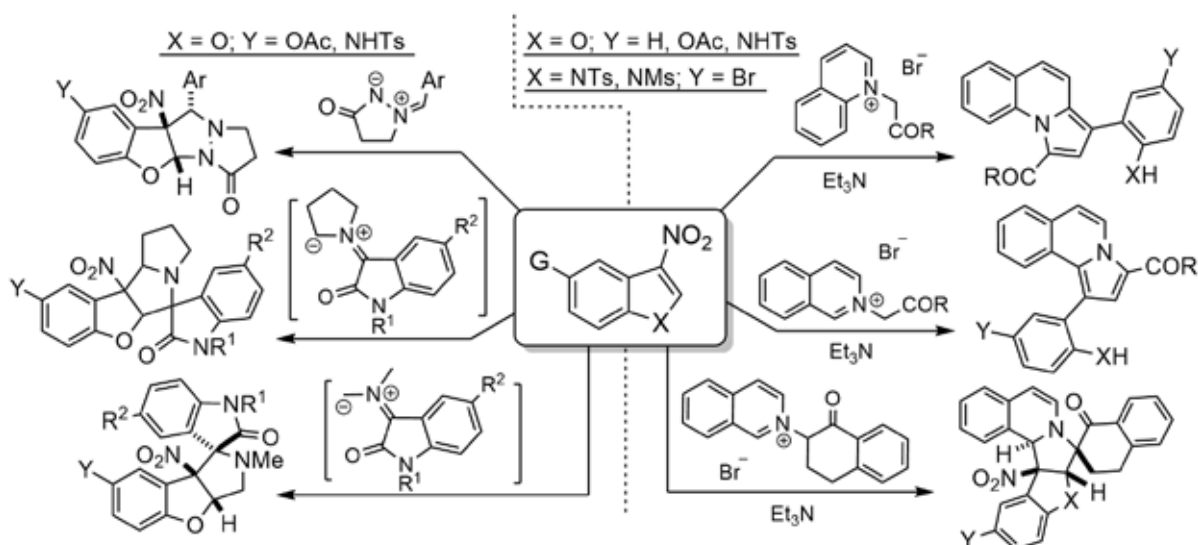
# ДЕАРОМАТИЗАЦИЯ 3-НИТРОБЕНЗОФУРАНОВ И 3-НИТРОИНДОЛОВ В РЕАКЦИЯХ ФОРМАЛЬНОГО [3+2]-ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ С АЗОМЕТИН-ИМИНАМИ И АЗОМЕТИН-ИЛИДАМИ

**Осипов Д.В.,** Рашепкина Д.А., Демидов М.Р., Корженко К.С., Осянин В.А.

Самарский государственный технический университет, 443100, Самара, ул. Молодогвардейская 244,  
e-mail: osipovdv25@mail.ru

Акцепторное влияние нитрогруппы в  $\beta$ -положении бензофурана и индола приводит к активации связанной с ней двойной связи гетероциклического фрагмента, а аддитивные реакции с их участием протекают с потерей ароматичности. В частности, их введение в реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения открывает доступ к разнообразным гетероциклам.

Мы обнаружили, что *N,N*-циклические азометин-имины реагируют с 3-нитробензофуранами с образованием пироло[1,2-*a*]пиразолов как продуктов формального [3+2]-циклоприсоединения, при этом в условиях реакции 3-нитроиндолы оказываются инертными. В то же время, во взаимодействии с карбонил-замещенными илидами хинолиния и изохинолиния вступают как 3-нитробензофураны, так и 3-нитроиндолы. Вследствие раскрытия первоначально образующегося циклоаддукта реакция приводит к пирроло[1,2-*a*]хинолинам или пирроло[2,1-*a*]изохинолинам. Мы заметили, что в случае производных изохинолина реакция может остановиться на стадии образования циклоаддукта в случае трудности или невозможности его енолизации. Также мы показали, что 3-нитробензофураны активно реагируют с азометин-илидами, генерируемыми из изатина и пролина или саркозина с получением спирооксидолов. Во всех упомянутых примерах циклоаддукты образуются в виде единственного диастереомера, за исключением реакции бензофурана с замещенными по карбоциклу изатинами и пролином, в результате которой образуется смесь диастереомеров в примерно равном соотношении.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-10109.

# ПРИВЕДЕННЫЕ ПАРАМАГНИТНЫЕ СДВИГИ – НОВЫЙ МЕТОД АНАЛИЗА СПЕКТРОВ ЯМР ПАРАМАГНИТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

[Павлов А.А.](#)

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,  
г. Москва, Россия, 119991, Москва, ул. Вавилова 28,  
e-mail: pavlov@ineos.ac.ru*

На заре своего создания спектроскопия ЯМР традиционно использовалась для установления химического состава диамагнитных соединений, в то время как применение данного метода для парамагнитных соединений считалось чрезвычайно затруднительным ввиду крайне быстрой ядерной релаксации. Однако, техническое развитие приборного оснащения в последние годы обусловило развитие метода спектроскопии ЯМР для парамагнитных соединений. Полученные в этой области результаты легли в основу ряда биологических и медицинских применений, таких как парамагнитные метки для исследования структур биологических макромолекул в растворе, агенты и сенсоры в МРТ.<sup>1</sup>

Существующие на сегодняшний день подходы к анализу спектров ЯМР парамагнитных соединений предполагают использование различных расчетных методов (квантово-химические и квантово-механические расчеты) для оценки контактного сдвига и конформационного анализа в растворе. Поскольку в основе таких расчетов содержится большое количество приближений, такой подход зачастую приводит к ошибочным результатам. Во многих случаях данные тех ядер молекулы, которые демонстрируют богатую конформационную динамику или содержат значительный контактный вклад, исключают из рассмотрения, что негативно влияет на достоверность результатов. Более того, в том случае, если большинство регистрируемых ЯМР ядер в молекуле имеют вышеуказанные недостатки, анализ спектров принципиально недостоверен.

В настоящем докладе будет обсуждаться новый альтернативный подход к анализу данных парамагнитного ЯМР, основанного на анализе температурной зависимости химических сдвигов.<sup>2</sup> Апробация предлагаемого подхода на ряде комплексов переходных металлов показала его эффективность в тех случаях, когда стандартные методы неприменимы.<sup>3</sup>

## Литература

1. Bertini I., Luchinat C., Parigi G. et al. NMR of paramagnetic molecules: applications to metalloproteins and models – Амстердам: Elsevier, 2017. – 490с.
2. Pavlov A.A., Nehr Korn J., Zubkevich S. *Inorg. Chem.*, 2020, **59**, 10746.
3. Pavlov A.A., Novikov V.V., Nikovskiy I.A. *Inorg. Chem.*, 2021, *submitted*.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 20-73-00194.*

# СИНТЕЗ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКСАРЕНА И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С БЕЛКАМИ

Падня П.Л., Стойков И.И.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия  
420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлёвская, 18  
e-mail: padnya.ksu@gmail.com*

Мультивалентные взаимодействия, основанные на слабых нековалентных связях, являются обратимыми и играют решающую роль в процессах распознавания, адгезии и передачи сигналов. Концепция мультивалентности используется в последние годы в супрамолекулярной химии для создания четко определенных структур и вызова биологической реакции, что привело к появлению новых наноматериалов и молекулярных устройств.

Исследование способности синтетических (макро)молекул к взаимодействию с поверхностью белковых структур является перспективной задачей при изучении их биологической активности и разработке бионаноматериалов. Создание молекул, способных к распознаванию поверхности белков, представляется актуальной темой, вызывающий теоретический и практический интерес. Для создания подобных синтетических рецепторов предложено использование наиболее изученную и перспективную макроциклическую платформу – (тиа)каликсарены.

В данной работе представлен подход к получению серии водорастворимых полифункциональных производных тиакаликс[4]арена, содержащих положительно и отрицательно заряженные фрагменты по нижнему ободу макроцикла, в различных стереоизомерных формах – конус, частичный конус и 1,3-альтернат. Было показано, что полученные соединения способны к эффективному и селективному взаимодействию с рядом белков – бычьим сывороточным альбумином, гемоглобином, лизоцимом, химотрипсином, холинэстеразами, рибонуклеазой А.

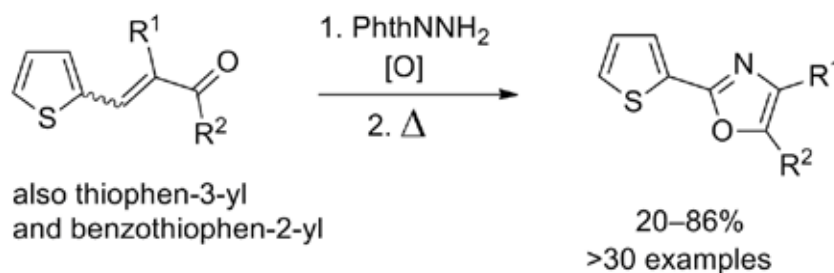
*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (No. 19-73-10134) и гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых ученых и ведущих научных школ Российской Федерации (МК-12.2020.3, НШ-2499.2020.3)*

# АЛКЕНИЛТИОФЕНЫ В УСЛОВИЯХ ОКИСЛИТЕЛЬНОГО АМИНОАЗИРИДИНИРОВАНИЯ

Панькова А.С., Кузнецов М.А.

*Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет,  
198504, Санкт-Петербург, Университетский проспект 26,  
e-mail: a.pankova@spbu.ru*

Известно, что тиофен может давать трициклический бисазиридин<sup>1</sup> в результате окислительного аминоазиридинирования<sup>2</sup>, в отличие от фурана<sup>3</sup> и пиррола. При этом экзоциклическая двойная связь алкенилтиофенов проявляет гораздо более высокую активность в азиридинировании, и в результате могут быть получены 2-тиофенилазиридины. Дизамещённые по атомам углерода соединения вполне устойчивы, тогда как тризамещённые аналоги нестабильны и легко раскрываются по связи С–С. Наличие карбонильной группы в одном из заместителей позволяет реализоваться 1,5-электроциклизации азометинида в оксазол<sup>4</sup>. В итоге суммарная последовательность являет собой прекрасный способ синтеза 2-тиофенилоксазолов из ациклических предшественников. При определенных условиях возможны дополнительные перегруппировки, приводящие к весьма необычным продуктам.



Некоторые полученные 2-тиофенилоксазолы проявляют заметную флуоресценцию, и в ходе работы были исследованы их фотофизические свойства.

## Литература

1. A.S. Pankova, A.N. Blandov, M.K. Bulanova, S.I. Selivanov, I.V. Ananyev, M.A. Kuznetsov *Tetrahedron Lett.* 2011, **52**, 4048-4050.
2. M.A. Kuznetsov, L.M. Kuznetsova, A.S. Pankova *Tetrahedron Lett.* 2016, **57**, 3575-3585.
3. M.V. Sorokina, A.S. Pankova, M.A. Kuznetsov *Asian J. Org. Chem.* 2016, **5**, 389-398.
4. A.S. Pankova, M.A. Kuznetsov *Synthesis* 2017, **49**, 5093-5104.

*Исследования проведены с использованием оборудования ресурсных центров СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Оптические и лазерные методы исследования вещества».*

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 18-73-00089.*

# ПРИРОДНЫЕ ТЕТРАПИРРОЛЫ В УСТРОЙСТВАХ ФОТОПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Пахомов Г.Л.,<sup>а,б</sup> Койфман О.И.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
153000 Иваново, Шереметьевский проспект, 7,  
e-mail: pakhomov@ipmras.ru*

<sup>б</sup>*Институт физики микроструктур Российской Академии Наук,  
603950 Нижний Новгород, ГСП-105*

Природные тетрапирролы, особенно такие как хлорофилл и его производные, крайне привлекательны для применения в солнечных батареях, во-первых, из-за явной фотоэлектрической активности и стабильности, а во-вторых, из-за огромных ресурсов и отсутствия экологических проблем [1]. Первые масштабные работы в этом направлении проводились ещё в послевоенные годы под руководством акад. А.Н. Теренина. Тем не менее, до сих пор большинство практически-ориентированных исследований останавливается на стадии сенсibilизации готовых матриц с помощью хлорофиллов, хотя и там прорывных результатов пока нет [1]. Очевидно, существуют фундаментальные трудности, препятствующие появлению устойчивых и эффективных оптоэлектронных устройств использующих потенциал этих природных фотоабсорберов.

В докладе делается краткий обзор существующих литературных достижений в области тонкопленочных фотовольтаических ячеек с активным гетеропереходом на основе хлорофиллоподобных молекул, включая различные лабораторные технологии получения и схемы устройств. Особое внимание уделяется лабораторным способам нанесения тонких молекулярных слоев и их структуре.

Показано, что одной из критических проблем является слабое представление о связи реальной морфологии фотоактивного слоя с его зарядо-транспортными характеристиками, обусловленное в том числе тем, что внимание специалистов ограничено уровнем сложности «молекула→агрегат в растворе», то есть не распространяется на объемные (твердотельные) процессы.

Приводятся и обсуждаются собственные результаты фотоэлектрических измерений на пленках производных феофорбида, хлорина и этиопорфирина [2].

## Литература

1. Koifman O.I., Stuzhin P.A., Travkin V.V., Pakhomov G.L. *RSC Adv.*, 2021, **11**, 15131.
2. A.I. Коптыаев, V.V. Travkin, Y.I. Sachkov, Y.V. Romanenko, G.L. Pakhomov, *J Mater Sci: Mater Electron*, 2021, 32, DOI:10.1007/s10854-021-06315-5.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-13-00285.*

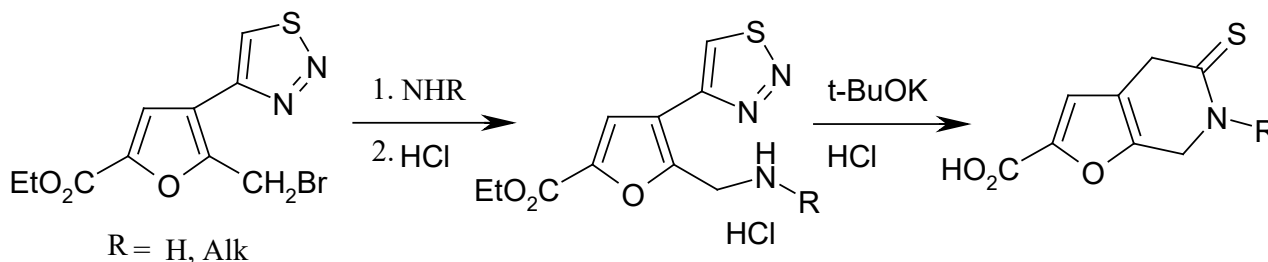
# 1,2,3-ХАЛЬКОГЕНОДИАЗОЛЫ В РЕАКЦИЯХ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОЙ ЦИКЛИЗАЦИИ ПЕТРОВ

**Петров М.Л.,** Певзнер Л.М., Попова Е.А., Ремизов Ю.О.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт,  
 190013, Санкт-Петербург, Московский проспект 26,  
 e-mail: mlpetrov@mail.ru

5-Незамещенные 1,2,3-халькогендиазолы при взаимодействии с сильными основаниями раскрывают 1,2,3-халькогендиазольный цикл с выделением азота и образованием тио- и селенокетенов<sup>1</sup>. Последние способны реагировать с различными нуклеофилами, что можно использовать как метод синтеза ациклических и гетероциклических соединений. Так, раскрытие под действием оснований халькогендиазольного кольца 4-арил-1,2,3-тиа- и селенадиазолов, имеющих нуклеофильную функциональную группу (SH, OH или NH<sub>2</sub>) в *орто*-положении к тиadiaзольному заместителю, приводит к внутримолекулярной 5-экзо-диг-циклизации генерируемого тиокетена с получением бензо[b]фуранов, бензо[b]тиофенов и индолов.

Возможность образования конденсированных неароматических гетероциклов из производных такой гибридной системы как 4-(2-метилфуран-3-ил)-1,2,3-тиадиазол была подтверждена реакцией раскрытия тиadiaзольного цикла этилового эфира 5-аминометил-4-(1,2,3-тиадиазол-4-ил)фуран-2-карбоновой кислоты. Так, под действием оснований раскрытие тиadiaзольного кольца 5-аминометил-4-(1,2,3-тиадиазол-4-ил)фуран-2-карбоновой кислоты, имеющей



нуклеофильную функциональную группу CH<sub>2</sub>NHR в положении, соседствующем с тиadiaзольным заместителем, приводит к внутримолекулярной 6-эндо-диг-циклизации генерируемого тиокетена с внутренним нуклеофилом CH<sub>2</sub>NHR<sup>2</sup>.

## Литература

1. Петров М.Л., Андросов Д.А.: *Журнал Органической химии*, 2013, **49**, 497.
2. Ремизов Ю.О., Певзнер Л.М., Петров М.Л. *Журнал Общей химии*, 2019. **89**, 1616.

Работа выполнена в рамках базовой части государственного задания Министерства образования и науки России (проект № 785.00X6019).



# СИНТЕЗ КОНЬЮГАТОВ НА ОСНОВЕ ИНГИБИТОРА ПСМА С ХЕЛАТИРУЮЩИМ АГЕНТОМ DOTA ДЛЯ АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ ДИАГНОСТИЧЕСКОГО РАДИОНУКЛИДА $^{68}\text{Ga}$

[Петров С.А.](#), Мачулкин А.Э., Зык Н.Ю., Успенская А.А.

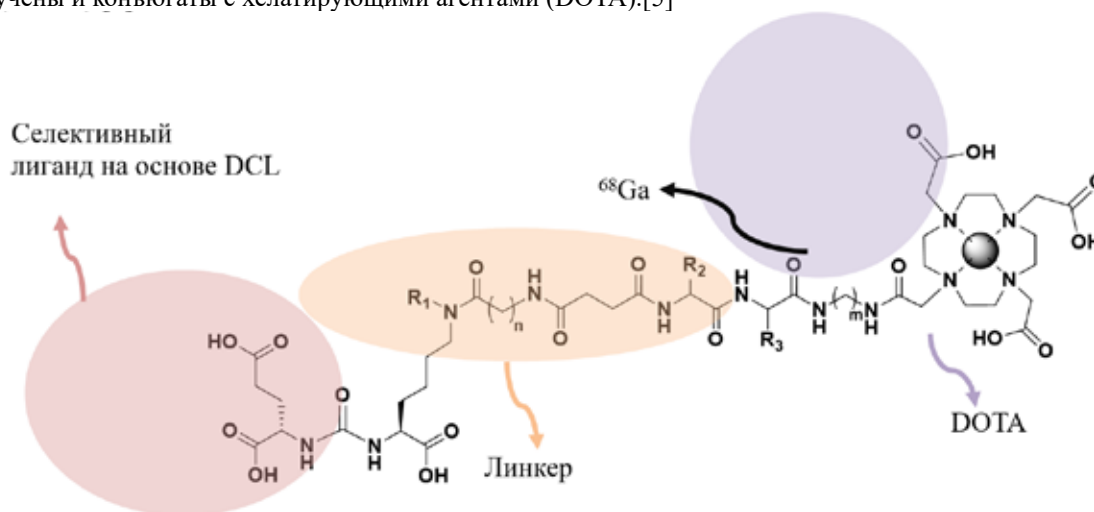
Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет  
E-mail: stanislavpetrovsh1994@gmail.com

Рак предстательной железы (РПЖ) является одним из наиболее часто диагностируемых злокачественных новообразований у мужчин во всем мире и остается одной из основных причин их смерти от рака. Данное заболевание ответственно за 6,6% случаев смерти от онкологических заболеваний среди мужчин, занимая пятое место по этому показателю. [1]

Одним из перспективных направлений в терапии и диагностике онкологических заболеваний предстательной железы является таргетная доставка в раковые клетки лекарственных и диагностических препаратов. Преимуществами такого подхода является уменьшение побочных эффектов и вводимой дозы для улучшения качества диагностики и терапии заболевания. [2]

Из-за высокой экспрессии простат-специфического мембранного антигена (ПСМА) на клеточной мембране клеток рака предстательной железы, этот белок представляет собой привлекательную молекулярную мишень для терапии и диагностики РПЖ. [3] В данный момент эталоном при разработке средств адресной доставки к простатическому специфическому мембранному антигену является ингибитор на основе мочевины - DCL вследствие его стабильности, высокой аффинности и хорошей биодоступности. [4]

Результаты докинга показывают, что лиганды, содержащие дипептидные линкеры, лучше связываются с ПСМА и показывают наиболее высокую селективность. В настоящей работе были оптимизированы пути синтеза линкеров лигандов, селективно связывающихся с ПСМА. Были выбраны лиганды, показывающие наиболее высокую избирательность, и на их основе получены и конъюгаты с хелатирующими агентами (DOTA).[5]



В докладе будут подробно рассмотрены подходы к синтезу данных конъюгатов, а также результаты биологических исследований (аффинность, биораспределение, накопление, селективность к ПСМА экспрессирующим и неэкспрессирующим клеточным линиям).

## Литература

1. F. Bray, J. Ferlay, I. Soerjomataram, R. L. Siegel, L. A. Torre and A. Jemal, CA. Cancer J. Clin., 2018, 68, 394–424.
2. J. H. Jang, S. J. Han, J. Y. Kim, K. Il Kim, K. C. Lee and C. S. Kang, ChemistryOpen, 2019, 8, 451–456.
3. H. Wang, Y. Byun, C. Barinka, M. Pullambhatla, H. eun C. Bhang, J. J. Fox, J. Lubkowski, R. C. Mease and M. G. Pomper, Bioorganic Med. Chem. Lett., 2010, 20, 392–397.
4. S. M. Hillier, K. P. Maresca, F. J. Femia, J. C. Marquis, C. A. Foss, N. Nguyen, C. N. Zimmerman, J. A. Barrett, W. C. Eckelman, M. G. Pomper, J. L. Joyal and J. W. Babich, Cancer Res., 2009, 69, 6932–6940.
5. Machulkin, A.E., et al., J. Drug Target. 2016, V. 24, P. 679-93.

# СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ О-АЗОЛИЛАЛКИЛ-N-(СУЛЬФАМОИЛФЕНИЛ) КАРБАМАТОВ, -ТИОКАРБАМАТОВ И ИХ АНАЛОГОВ

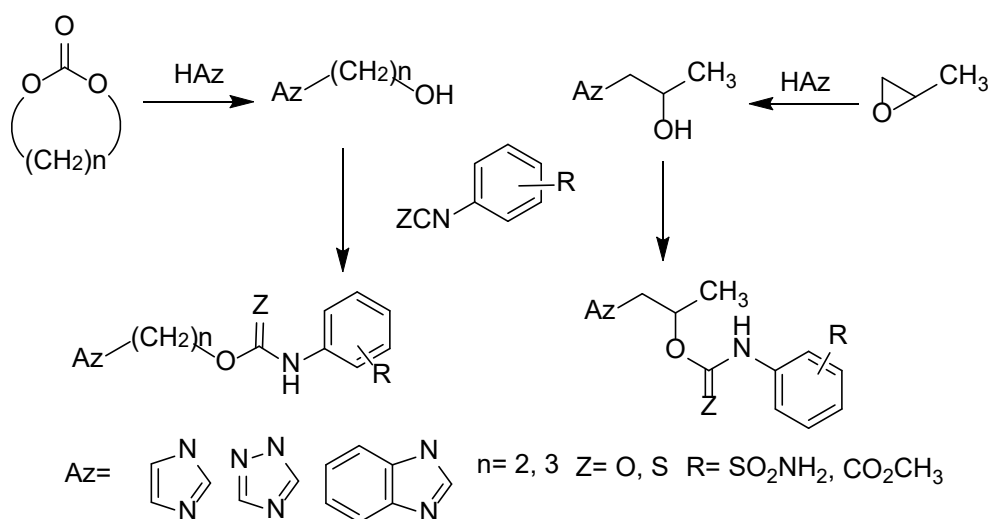
**Попков С.В.,** Карманова Р.А., Обидовская Е.С., Алексеенко А.Л.

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева,  
125047, г. Москва, Миусская площадь, 9,  
popkov\_sv@muctr.ru,

Сердечно-сосудистые заболевания занимают первое место среди причин смертности в развитых странах. Важную роль в предотвращении инсультов и инфарктов занимают антиагреганты, в число которых входит такой имидазолсодержащий ингибитор тромбоксансинтетазы как *озагрел*. Ряд карбаматов - производных азолилметанолов и азолилэтанолов снижают свертываемость крови [1], действуя подобным образом. В тоже время близкие тиокарбаматные аналоги проявляют высокую фунгитоксичность. Такое действие, как и для большинства применяемых азольных фунгицидных и антимикотических препаратов обусловлено ингибированием биосинтеза эргостерина на стадии С14-деметилирования ланостерина Р-450 цитохромоксидазой (СУР51). С другой стороны, фармакофорный бензолсульфамидный фрагмент входит в состав многих бактерицидных, противодиабетических препаратов, а также антагонистов тромбоксанового рецептора, как, например, *ра-матробан*.

Химерные соединения, включающие в свой состав азольное кольцо и бензолсульфамидный фрагмент, проявляют как антиагрегационные, так и противомикробные свойства.

Ключевые азолилалканолы получены раскрытием циклических карбонатов или пропиленоксида азолами. Последующая конденсация с замещенными фенилизоцианатами или -тиоизоцианатами приводит к О-азолилалкил-N-(сульфамойл-фенил)карбаматам и их аналогам.



## Литература

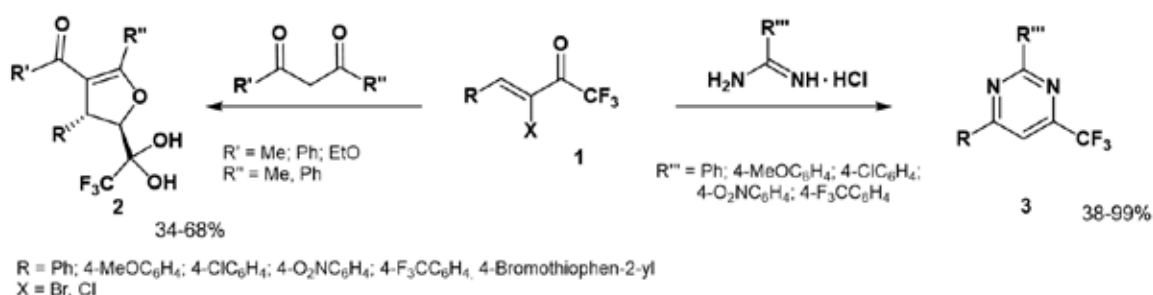
1. Попков С.В., Алексеенко А.Л., Лобанова Е.Г. и др. Патент 2488583 РФ, 2013.

# СЕЛЕКТИВНАЯ СБОРКА ПЯТИ- И ШЕСТИЧЛЕННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ ИЗ ФТОРИРОВАННЫХ $\alpha$ -ГАЛОГЕНЕНОНОВ

**Попов А.В.,** Кобелевская В.А., Рулёв А.Ю.

ФГБУН Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН,  
664033, Иркутск, ул. Фаворского 1, Россия,  
e-mail: popov@irioch.irk.ru

Разработаны методы синтеза малых гетероциклов на основе реакции 1,3-бинуклофилов с фторированными  $\alpha$ -галогененонами **1**, которые, как известно, часто проявляют нетривиальную реакционную способность<sup>1</sup>.



Показано, что взаимодействие галогененонов **1** с 1,3-дикарбонильными соединениями протекает хемо- и стереоселективно, приводя в мягких условиях к трифторметилированным дигидрофуранам **2** с умеренными выходами<sup>2</sup>. Напротив, N-центрированные 1,3-бинуклофилы (например, амидины) легко реагируют с  $\alpha$ -броменонами **1**, образуя шестичленные гетероциклы **3**<sup>3</sup>. Сборка пиримидинового ядра происходит в некаталитических условиях с высокой селективностью и выходами, нередко близкими к количественным.

Обсуждаются причины различий в сборке пяти- и шестичленных гетероциклов, а также механизмы изученных реакций.

## Литература

1. A. Yu. Rulev. *Eur. J. Org. Chem.*, 2018, **2018**, 3609.
2. A. V. Popov, A. V. Mareev, V. A. Koblelevskaya, S. V. Zinchenko, A. V. Vashchenko, A. Yu. Rulev. *J. Fluor. Chem.*, 2021, <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2021.109819> (in Press).
3. A. R. Romanov, A. Yu. Rulev, A. V. Popov, E. V. Kondrashov, S. V. Zinchenko. *Synthesis* 2020, **52**, 1512.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-03-00206.

# N-ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ КАРБЕНЫ КАК ЭФФЕКТИВНЫЕ ЛИГАНДЫ ДЛЯ СИНТЕЗА ПРЕКАТАЛИЗАТОРОВ

**Прима Д.О.,<sup>a</sup> Мадиева М.,<sup>a,b</sup> Куликовская Н.С.,<sup>a</sup> Анаников В.П.<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>Институт органической химии РАН им. Н.Д. Зелинского, Москва, Россия,

<sup>b</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

e-mail: prima@ioc.ac.ru

N-гетероциклические карбены (NHC) широко используются как лиганды, особенно для переходных металлов. Лиганды NHC синтетически привлекательны из-за широких возможностей модификации структуры, а также образованием стабильных связей NHC–металл (рисунок 1).<sup>1</sup> NHC присутствуют во множестве комплексов, многие из которых служат прекатализаторами для каталитических реакций.

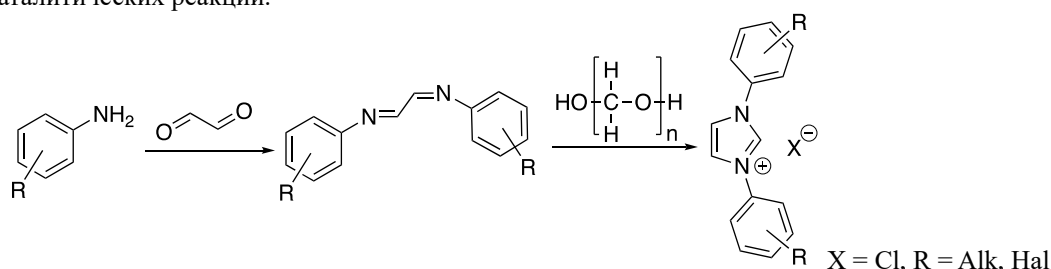


Рисунок 1. Общая схема синтеза симметричных NHC-лигандов.

Синтезированы новые мостиковые NHC-комплексы **1-3** и исследована их каталитическая активность на модельной реакции ариламинирования по Бахвальду-Хартвигу (рисунок 2).

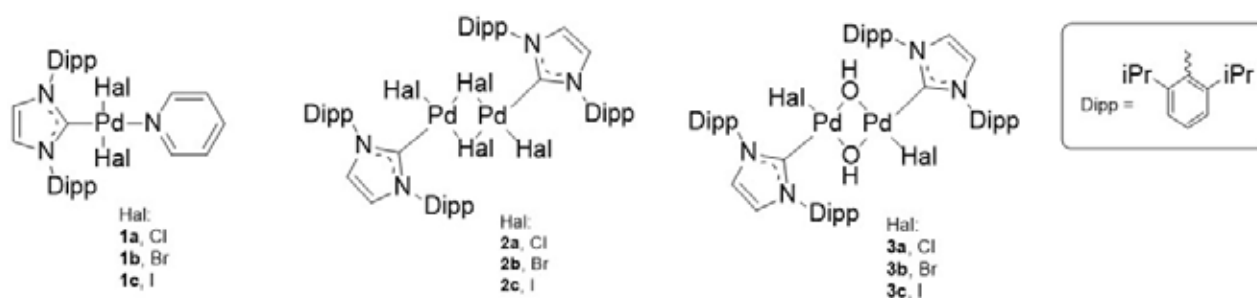


Рисунок 2. Pd-NHC комплексы 1-3.

Показано, что бромидные Pd-NHC комплексы эффективнее по сравнению с хлоридными или йодидными аналогами. Это можно объяснить двумя факторами: энергетической характеристикой окислительного присоединения и стабильностью образующихся комплексов в растворе.<sup>2</sup> При исследовании механизма модельной реакции обнаружено, что система ведет себя как динамическая с образованием коктейля катализаторов.

## Литература

1. Koy, M., Bellotti, P., Das, M., Glorius, F. *Nat. Catal.* **2021**, 4, 352.
2. Galushko, A.S., Prima, D.O., Burykina, J.V., Ananikov, V.P. *Inorg. Chem. Front.* **2021**, 8, 620.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-73-00259.

# ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИ ПРОМОТИРУЕМЫЙ СИНТЕЗ ТРИАЗОЛОВ

[Родыгин К.С.](#),<sup>a</sup> Самойленко Д.Е.,<sup>a</sup> Анаников В.П.<sup>a,б</sup>

<sup>a</sup>Санкт-Петербургский государственный университет,  
198504, СПб, Университетский пр-т, 26,

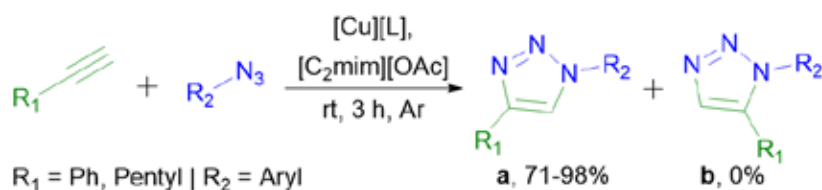
e-mail: k.rodygin@spbu.ru

<sup>б</sup>ИОХ им. Н.Д. Зелинского,

119991, Москва, Ленинский пр-т, 47

Медь-катализируемые реакции являются ключевым инструментом современного органического синтеза<sup>1</sup>. Получение медного катализатора – довольно многостадийный процесс, начинающийся с извлечения металла из руды и перевода полученного металла в состав различных солей. Далее, при катализе к солям меди добавляют различные восстановительные агенты, в результате чего вновь получается металлическая медь.

В настоящей работе предлагается использовать в качестве катализатора непосредственно металл – медный электрод. В ходе пропускания тока через систему, медь переходит в раствор и обеспечивает катализ. В качестве модельной реакции для выяснения возможности данного процесса была выбрана клик-реакция между алкинами и азидами с образованием триазолов.



В качестве растворителя использовались ионные жидкости, которые, благодаря своим свойствам, одновременно являлись средой реакции и стабилизаторами для образующихся каталитически активных частиц<sup>2</sup>.

В работе показываются границы метода, оптимизация, исследование механизма, а также возможность регенерации как ионных жидкостей, так и медного катализатора. Кроме того, показана применимость изложенного подхода для реакции Ульмана.

Предложенный подход позволяет не только эффективно осуществлять синтез триазолов, но также и позволяет пропустить несколько стадий в получении сложных медных катализаторов. Очистка конечного раствора от ионов меди также осуществляется в электрохимической ячейке путем смены полярности на обратную, что позволяет избежать загрязнения продуктов металлом.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 19-29-08020.

## Литература

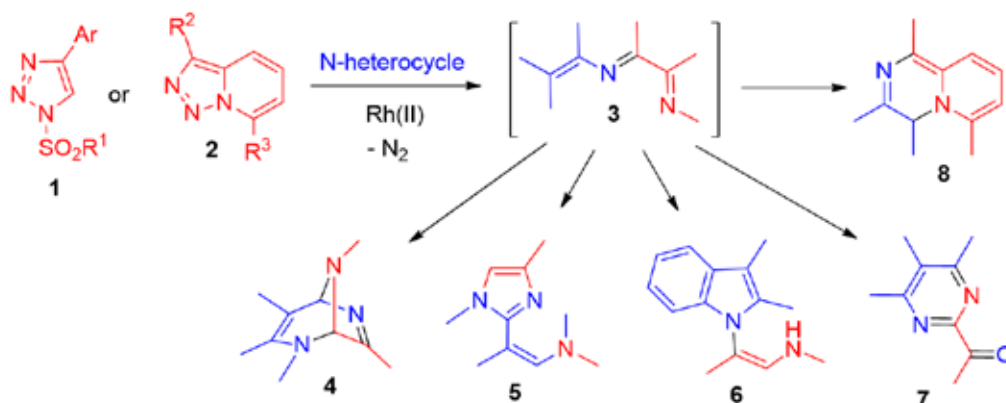
1. a) P. Mäki-Arvela, I. L. Simakova, T. Salmi and D. Y. Murzin, *Chem. Rev.*, 2014, **114**, 1909-1971; b) J.-P. Corbet and G. Mignani, *Chem. Rev.*, 2006, **106**, 2651-2710; c) D. Ma and Q. Cai, *Accounts of Chemical Research*, 2008, **41**, 1450-1460; d) J. Heveling, *J. Chem. Edu.*, 2012, **89**, 1530-1536; e) T.-T. Zhuang, Y. Pang, Z.-Q. Liang, Z. Wang, Y. Li, C.-S. Tan, J. Li, C. T. Dinh, P. De Luna, P.-L. Hsieh, T. Burdyny, H.-H. Li, M. Liu, Y. Wang, F. Li, A. Proppe, A. Johnston, D.-H. Nam, Z.-Y. Wu, Y.-R. Zheng, A. H. Ip, H. Tan, L.-J. Chen, S.-H. Yu, S. O. Kelley, D. Sinton and E. H. Sargent, *Nature Catal.* 2018, **1**, 946-951.
2. M.M. Seitkalieva, D.E. Samoilenko, K.A. Lotsman, K.S. Rodygin, V.P. Ananikov, *Coord. Chem. Rev.*, 2021, In print, DOI: 10.1016/j.ccr.2021.213982

# РОДИЙ-КАТАЛИЗИРУЕМЫЕ РЕАКЦИИ 1,2,3-ТРИАЗОЛОВ В СИНТЕЗЕ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

**Ростовский Н.В.**, Стрельникова Ю.О., Хайдаров А.Р., Тюфтяков Н.Ю., Филиппов И.П., Новиков М.С.

Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,  
 198504, Россия, г. Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр., 26,  
 e-mail: n.rostovskiy@spbu.ru

На основе катализируемой Rh(II) реакции *N*-сульфонил-1,2,3-триазолов **1** (или пиридоотриазолов **2**) с доступными *N*-гетероциклами нами разработан подход к одностадийному синтезу уникальных гетероциклов, перспективных для фармацевтики. Реакции протекают через образование азаполиенов **3** с последующей их циклизацией или перегруппировкой. С использованием триазолов **1** и пиразолов<sup>1</sup> были синтезированы аза-мостиковые соединения **4** и (*Z*)-2-(2-аминовинил)имидазолы **5**. Новые (*Z*)-1-(2-аминовинил)индолы **6** были получены в реакции триазолов **1** с 2,2-диарил-2*H*-азиринами<sup>2</sup>. На основе реакции триазолов **1** с 3,4,5-тризамещенными изоксазолами разработан удобный метод синтеза 2-ароилпириимидинов **7**. Наконец, реакция пиридоотриазолов **2** с 2*H*-азиринами дает стабильные неароматические 4*H*-пиридо[1,2-*a*]пиразины **8**<sup>3</sup>. Механизмы указанных реакций были исследованы экспериментально и с помощью DFT-расчетов. Изучена антибактериальная и цитотоксическая активность некоторых полученных гетероциклов.



## Литература

1. Strelnikova J.O., Koronotov A.N., Rostovskii N.V., Khlebnikov A.F., Khoroshilova O.V., Kryukova M.A., Novikov M.S. *Org. Lett.* 2021, **23**, 4173.
2. Khaidarov A.R., Rostovskii N.V., Zolotarev A.A., Khlebnikov A.F., Novikov M.S. *J. Org. Chem.* 2019, **84**, 3743.
3. Filippov I.P., Novikov M.S., Khlebnikov A.F., Rostovskii N.V. *Eur. J. Org. Chem.* 2020, 2904.

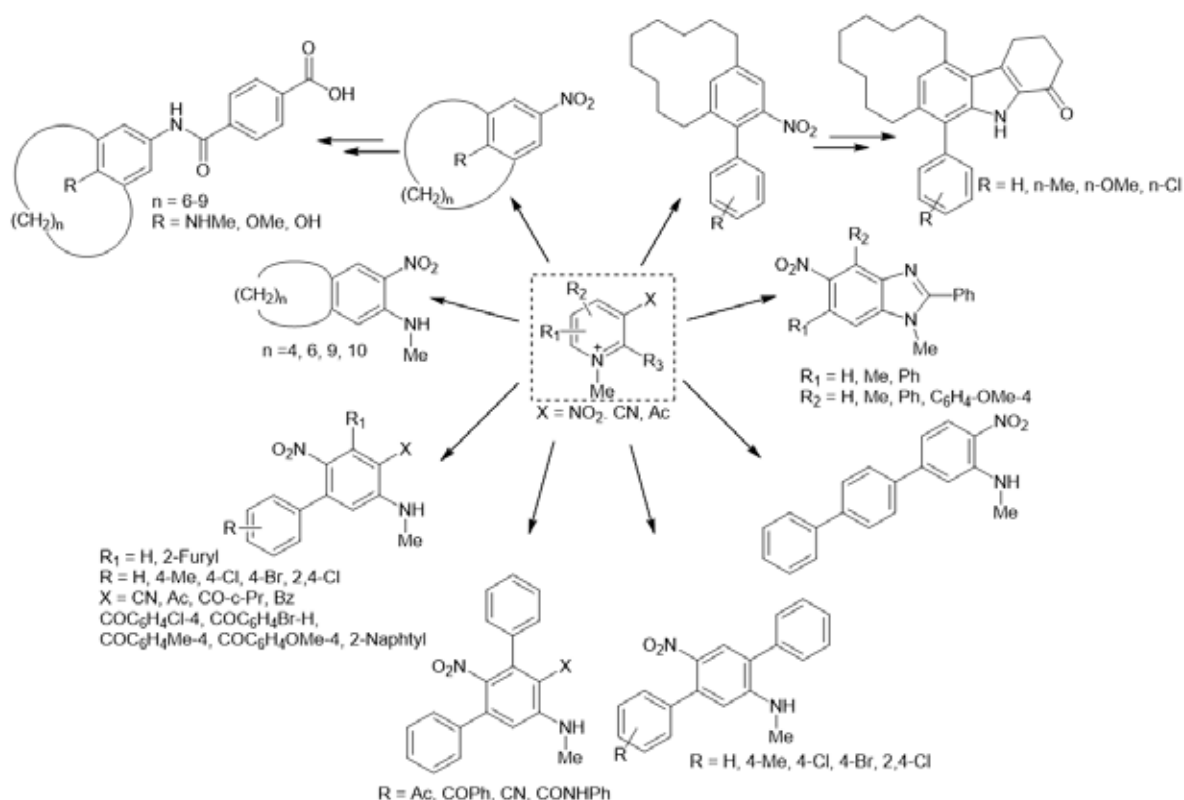
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, гранты № 17-13-01078 и № 19-73-10090. Авторы выражают благодарность сотрудникам ресурсных центров СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества» и «Рентгенодифракционные методы исследования».

# ПЕРЕГРУППИРОВКА КОСТА-САГИТУЛЛИНА ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ ПИРИДИНИЯ

Сагитуллина Г.П.

Омский госуниверситет им. Ф. М. Достоевского  
e-mail: sagitullina@chemomsu.ru

Большой экспериментальный материал по перегруппировке сотен пиридиновых солей позволяет использовать ее как метод образования связи С-С в синтезе труднодоступных ароматических соединений. В докладе представлен синтез ретиноидов для лечения промиелоцитарного лейкоза на основе метациклофанов с копланарным и некопланарным бензольным циклом. Разработаны новые методы синтеза бифенилов, *мета*- и *пара*-терфенилов, бензимидазолов и 3-гидроксииндолинов. Иллюстрируется применение продуктов рециклизации в препаративных синтезах нитропирролов, индазолов, бензимидазолов, тетрагидроиндолов, пиразоло[3,4-*b*]пиридинов.

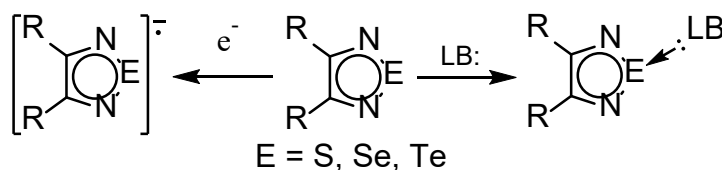




# 1,2,5-ХАЛЬКОГЕНАДИАЗОЛЫ – ЭФФЕКТИВНЫЕ АКЦЕПТОРЫ ЭЛЕКТРОНА ДЛЯ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ ХИМИИ

**Семенов Н.А., Радюш Е.А., Чуланова Е.А., Зибарев А.В.**

Новосибирский институт органической химии им. Н.Н.Ворожцова Сибирского Отделения  
 Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, проспект Лаврентьева 9,  
 e-mail: klaus@nioch.nsc.ru



1,2,5-халькогенадиазолы привлекательны как для фундаментальной химии, так и в материаловедении и биомедицине. По данным квантовохимических расчётов эти гетероциклы обладают большим положительным сродством к электрону, что делает их сильными акцепторами электрона.<sup>1</sup> Причем перенос электронной плотности в редокс процессах с участием этих соединений может быть как полным, так и частичным. В первом случае образуются долгоживущие анион-радикалы, которые могут быть выделены в виде солей и использованы как строительные блоки новых магнитных материалов, а также в органических проточных источниках тока. Во втором случае образуются комплексы с переносом заряда, проявляющие (фото)полупроводниковые свойства.

Помимо этого, 1,2,5-халькогенадиазолы проявляют способность образовывать супрамолекулярные комплексы с основаниями Льюиса (LB), координированными к халькогену. Образование этих комплексов в растворе детектируется ESI-MS, ЯМР и электронной спектроскопией, а также при помощи РСА; и объясняется донированием т.н.  $\sigma$ -дырок - областей локального максимума электростатического потенциала на поверхности молекулы.<sup>2</sup> Взаимодействие между  $\sigma$ -дыркой на халькогене и не поделённой парой электронов основания Льюиса называют «халькогенной связью» по аналогии с другими видами вторичных взаимодействий, такими как водородная связь, галогенная связь и др. Образование таких комплексов интересно с точки зрения молекулярного распознавания, сенсорики и транспорта анионов. Таким образом 1,2,5-халькогенадиазолы демонстрируют как  $\sigma$ - так и  $\pi$ -акцепторные свойства.

## Литература

1. Chulanova E.A., Semenov N.A., Pushkarevsky N.A., Gritsan N.P., Zibarev A.V., *Mendeleev Commun.* 2018, **28**, 453.
2. Chulanova E.A., Radiush E.A., Shundrina I.K., Bagryanskaya I.Y., Semenov N.A., Beckmann J., Gritsan N.P., Zibarev A.V., *Cryst. Growth Des.*, 2020, **20**, 9, 5868.

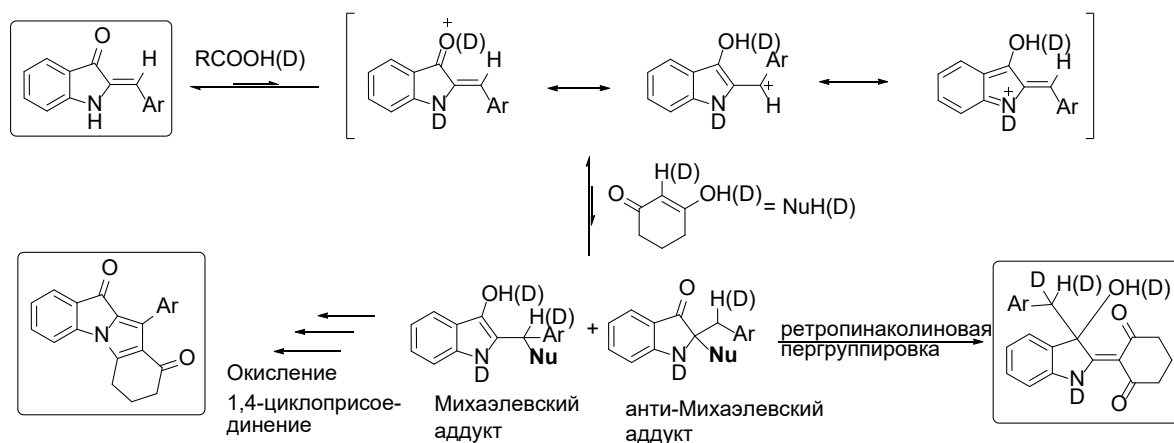
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты 20-33-90232 и 20-43-543016.

# КАСКАДНЫЕ РЕАКЦИИ ГЕМИИНДИГОИДОВ В СИНТЕЗЕ ИНДОЛЬНЫХ ПОЛИЦИКЛОВ – ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ ЯМР СПЕКТРОСКОПИИ И ДЕЙТЕРООБМЕНА

Сигеев А.С., Перегудов А.С., Филиппов О.А., Алексеева Е.А.,  
Ходак А.А., Вележева В.С.

Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук  
119991, ГСП-1, Москва, 119334, ул. Вавилова, 28.  
e-mail: sigeev@gmail.com

Каскадные реакции лежат в основе одного из наиболее важных и быстро развивающихся направлений современного органического синтеза, которое широко применяется для конструирования соединений сложного строения, в том числе индольных полициклов.<sup>1</sup> Данная методология открыла новые перспективы<sup>2</sup> в регио- и стереоселективном синтезе фармакологически значимых спиропсевдоиндоксильных, гидроксиндолининовых и оксоиндольных алкалоидов, способных к скелетным перегруппировкам с участием высокоактивных электрофильных интермедиатов - индолининов, катионов ими-ния и индолиденция.



Новые изучаемые нами катионные каскадные реакции 2-арилиден-3-индолинонов с  $\beta$ -дикарбонильными соединениями протекают через стадию образования резонансно стабилизированного иона оксокарбения. Многообразие получаемых продуктов (3-гидрокси-2-индолиден-циклогександионы-1,3 (20-80%), пирано[3,2-b]индолы (30-40%), пирроло[1,2-a]индолы (49-65%) и другие) обусловлено обращением полярности экзометиленовой связи  $\text{C}=\text{C}$ . Путь протекания реакций изучался методом ЯМР спектроскопии, в частности, исследованием внедрения дейтерия. Сделана оценка стабильности возможных катионных интермедиатов методом квантово-химических расчетов.

## Литература

1. К.С. Nicolaou, D.J. Edmonds, P.G. Bulger, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2006, **45**, 7134.
2. F.R. de Sa Alves, E.J. Barreiro, C.A. Fraga, *Mini-Rev. Med. Chem.*, 2009, **9**, 782.

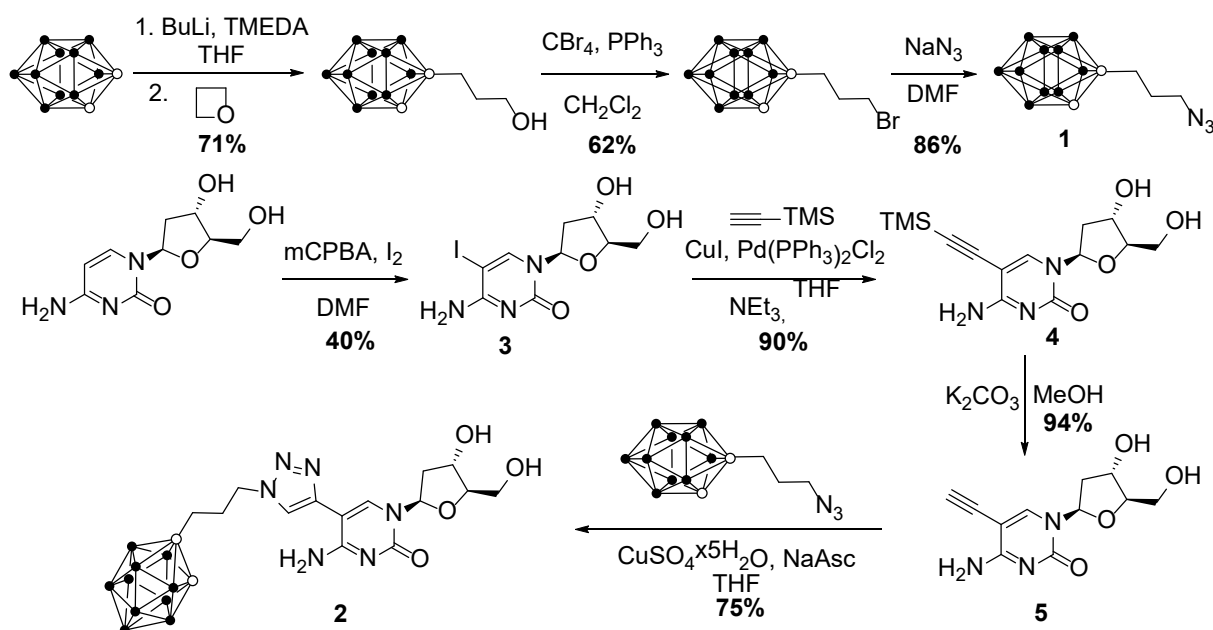
# БОР-ОБОГЩЕННЫЕ НУКЛЕОЗИДЫ ДЛЯ БОРНЕЙТРОНЗАХВАТНОЙ ТЕРАПИИ РАКА

Сколяпова А.Д., Ризебек Т.Н., Мостович Е.А.

Новосибирский государственный университет,  
 630090, Новосибирск, ул. Пирогова 1,  
 e-mail: sad.orellab@gmail.com

Борнейтронно-захватная терапия (БНЗТ) является перспективной технологией лечения рака, но лишь единичные соединения способны избирательно доставлять изотопы бора к опухолевым клеткам, что препятствует клиническому применению БНЗТ. Борсодержащие нуклеозиды представляются идеальными агентами для селективной доставки  $^{10}\text{B}$  в раковые клетки, где они были бы стабильно интегрированы в ДНК. Карбораны, благодаря легкости их химической модификации и устойчивости к гидролитической и ферментативной деградации, зарекомендовали себя как перспективные агенты для БНЗТ.

Азидопропилкарборан (**1**) получали в три стадии из *o*-карборана. Для синтеза *o*-карборанового производного **2** на первой стадии окислительным йодированием дезоксицитидина получали иодид **3**. Последний вводили в реакцию кросс-сочетания Соногаширы, получая ацетиленовое TMS-производное **4**. После снятия TMS-защитной группы терминальный ацетилен **5** превращали в производное триазина с *o*-карборановым остовом **2** путем азид-алкинового циклоприсоединения.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-74-20069.

# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ТИЕНОАЦЕНОВ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

[Скоротецкий М.С.](#),<sup>а</sup> Борщев О.В.,<sup>а</sup> Сосорев А.Ю.,<sup>б</sup> Парашчук Д.Ю.,<sup>б</sup> Пономаренко С.А.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> *Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН,  
117393, Москва, ул. Профсоюзная 70,  
e-mail: Skorotetskiy@ispm.ru*

<sup>б</sup> *Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
119991, Москва, Ленинские горы, 1/62*

Одно из замечательных преимуществ органических полупроводников это способность настраивать их свойства путем изменения их химической структуры. Среди большого разнообразия органических полупроводников аннелированные тиеноацены (рис.1) занимают особое место как многообещающие органические полупроводники с высокими характеристиками<sup>1</sup>.

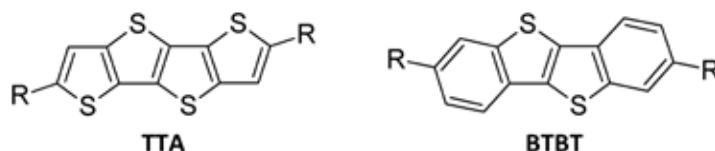


Рисунок 1. Структурные формулы тетратиеноацена(ТТА) и бензотиенобензотиофена(ВТВТ).

В данной работе описывается синтез, свойства и применение новых алифатических и ароматических производных ТТА в различных оптоэлектронных устройствах. Впервые изучено превращение ТТА в реакции ацилирования по Фриделю-Крафтсу<sup>2</sup>. Исследованы характеристики органических полевых транзисторов на их основе, полученных как растворными, так и вакуумными методами. Так же обсуждается влияние динамического беспорядка на перенос заряда внутри аннелированных органических полупроводников<sup>3</sup>.

## Литература

1. Borshchev O.V, Skorotetskiy M.S., Trukhanov V.A. et. al. *Dyes Pigm.* 2021, **185**, 108911
2. Skorotetskiy M.S., Borshchev O.V, Polinskaya M.S. et. al. *J. Mater. Chem. C* 2021, submitted
3. Sosorev A.Y., Parashchuk O.D., Tukachev N.V. et. al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2021 accepted

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-30028.*

# СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ДИ- И ТРИАЗАДАМАНТАНОВ, СОДЕРЖАЩИХ МОНОТЕРПЕНОИДНЫЕ ЗАМЕСТИТЕЛИ

**Суслов Е.В.,<sup>а</sup> Пономарев К.Ю.,<sup>а</sup> Криницына Т.А.,<sup>а,б</sup> Котлярова А.А.,<sup>а,в</sup> Павлова А.В.,<sup>а</sup> Морозова Е.А.,<sup>а</sup> Кочагина Д.В.,<sup>а</sup> Толстикова Т.Г.,<sup>а,б</sup> Волчо К.П.,<sup>а,б</sup> Салахутдинов Н.Ф.<sup>а,б</sup>**

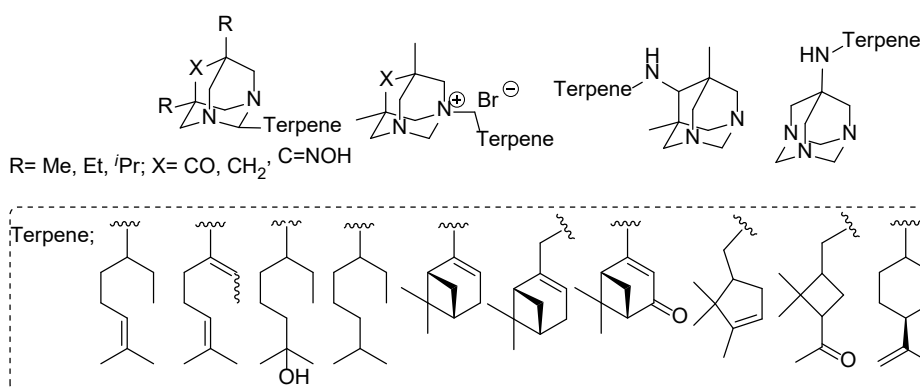
<sup>а</sup>НИОХ СО РАН, 630090, Новосибирск, просп. акад. Лаврентьева, 9.

<sup>б</sup>НГУ, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

<sup>в</sup>НИИКЭЛ– филиал «ФИЦ ИЦиГ СО РАН», 630060, Новосибирск,  
ул. Тимакова, 2

E-mail: suslov@nioch.nsc.ru

Азаадамантаны – азотистые аналоги адамантана, у которых один или несколько атомов углерода замещены на азот. Подобное строение приводит к ряду специфических свойств, как химических, биологических так и физических и обуславливает широкий спектр полезных качеств этих соединений. Нами были разработаны методы получения и синтезирована библиотека ди- и триазаадамантанов содержащих в своей структуре остатки различных монотерпеноидов.



Эти соединения были протестированы на различные типы биологической активности<sup>1-5</sup>: противовирусную (вирус гриппа, вирус герпеса, ортопоксвирусы), анальгезирующую и актопротекторную активность, а также ингибирующую активность по отношению к ферменту репарации ДНК человека тирозил-ДНК-фосфодиэстеразы 1 (Tdp1), перспективной мишени для противоопухолевой терапии. Практически во всех случаях были обнаружены соединения, показавшие высокую биологическую активность.

## Литература

- [1] K. Ponomarev, et al, *Medicinal Chemistry Research*, **2015**, 24, 4146-4156
- [2] K. Ponomarev, et al, *Medicinal Chemistry*, **2017**, 13, 773 – 779
- [3] E. Suslov, et al, *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, **2017**, 27, 4531-4535
- [4] K. Ponomarev, et al, *Bioorganic Chemistry*, **2018**, 76, 392-399
- [5] Е. Суслов, и др., *Известия Академии наук. Серия химическая*, **2019**, 3, 601-605

# N-ОКСИДНЫЙ ФРАГМЕНТ КАК РЕШАЮЩИЙ ФАКТОР ОБРАЗОВАНИЯ ФУРОКСАНИЛИМИНОВ

**Тесленко Ф.Е.,** Ларин А.А., Малышев В.И., Медведев М.Г.,  
Ферштат Л.Л., Махова Н.Н.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail fete01@mail.ru*

Амино-1,2,5-оксадиазол-2-оксиды (аминофуроксаны) **1** и **2** являются крайне слабыми нуклеофилами. Согласно литературным данным<sup>1</sup>, 4-аминоизомеры **1** являются более реакционноспособными субстратами, чем 3-аминофуроксаны **2**. Нами был разработан метод синтеза фуроксанилиминов **3** в мягких условиях, однако этот метод оказался пригоден лишь для 3-аминофуроксанов **2** (рис. 1). Квантовохимические расчёты, подтвержденные кинетическими исследованиями, показали третий порядок реакции.

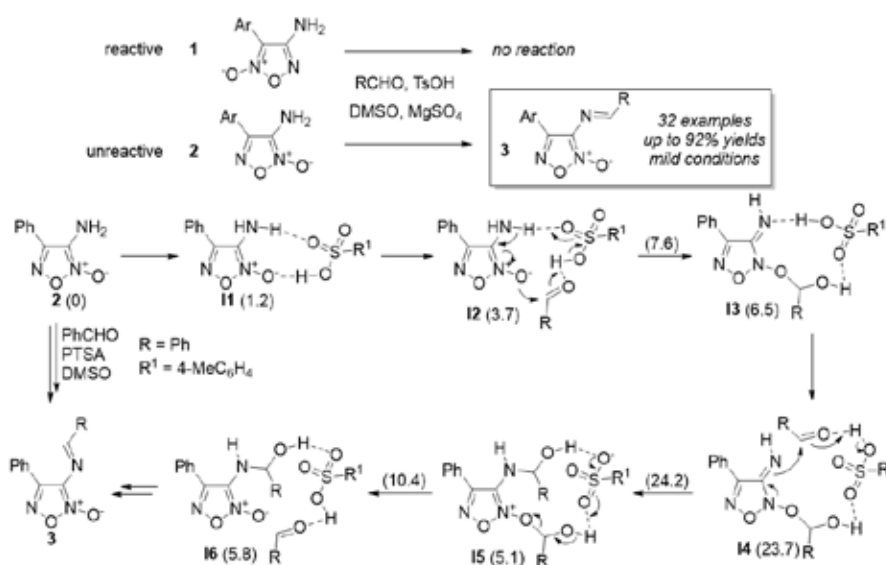


Рисунок 1. Синтез иминов **3** и механизм реакции (энергии приведены в ккал/моль)

Продемонстрирован синтетический потенциал полученных фуроксанилиминов **3**: была получена серия (карбамоил)фуразанов **5**, являющихся перспективными антипролиферативными агентами (рис. 2). Также было проведено селективное восстановление двойной C=N связи иминого фрагмента с получением соединений **4**, оказавшимися неустойчивыми к гидролизу. Попытки ввести **3** в реакцию Дильс-Альдера не увенчались успехом.

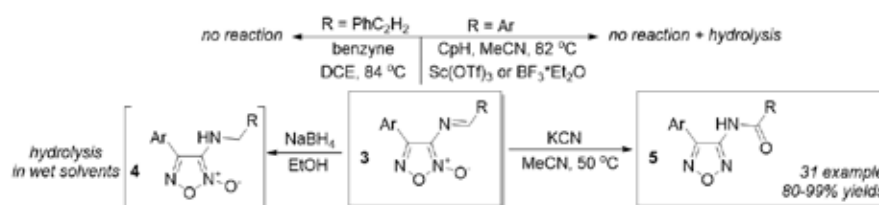


Рисунок 2. Синтетические трансформации фуроксанилиминов

## Литература

1. Bystrov, D.M., Fershtat, L.L., Makhova, N.N. *Chem. Heterocycl. Compd.* 2019, **55**, 1143

# СТЕРЕОДИВЕРГЕНТНАЯ ФОСФАЗЕНКАТАЛИЗИРУЕМАЯ РЕАКЦИЯ МИХАЭЛЯ В СИНТЕЗЕ ТЕТРАГИДРО-7-АЗА-ИНДОЛОВ

Тухтаев Х.Б., Иванов К.Л., Будынина Е.М.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
 химический факультет, 119234, Москва, Ленинские горы 1с3  
 e-mail: chem.hamidullo@gmail.com

Присоединение по Михаэлю является удобным инструментом для создания связи С–С, играя важную роль в синтезе полифункционализированных молекул. В последние годы интенсивно изучаются диастereo- и энантиоселективные варианты реакции Михаэля с использованием различных органических катализаторов, в частности, фосфазенов.<sup>1</sup>

В данном исследовании на основе стереоселективной фосфазенкатализируемой реакции Михаэля мы разработали стереодивергентный подход к фосфазенопирролидинам **2** и провели их трансформацию в тетрагидро-7-аза-индолы **3** (Рис. 1).<sup>2</sup>

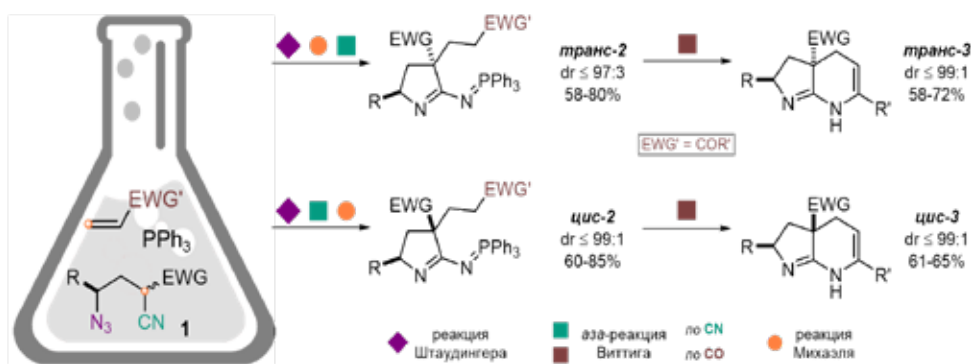


Рисунок 1. Стереодивергентный синтез тетрагидро-7-аза-индолов

Подход основан на каскадном превращении легко доступных  $\gamma$ -азидобутиронитрилов **1** по реакциям Штаудингера и Михаэля и *аза*-реакции Виттига. Промежучечно образующиеся в процессе фосфазены играют тройную роль: 1) катализаторов, 2) реагентов и 3) регуляторов стереоселективности. Изменение порядка стадий в каскаде позволяет получать селективно *транс*- или *цис*-фосфазены **2**. Новая стереодивергентная стратегия была использована нами в синтезе полного набора стереоизомеров тетрагидро-7-аза-индолов **3**.

## Литература

- Formica M., Rozsar D., Su G., Farley A. J. M., Dixon D. J. *Acc. Chem. Res.* 2020, **53**, 10, 2235.
- Tukhtaev H. B., Bezzubov S. I., Tarasenko E. A., Melnikov M. Ya., Ivanov K. L., Budynina E. M. *Adv. Synth. Catal.* 2021, in press.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ (№ 20-33-90329) и РНФ (№ 19-73-00244).



# СИНТЕЗ КОНЬЮГАТОВ НА ОСНОВЕ ЛИГАНДОВ ПСМА С ЦИАНИНОВЫМИ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫМИ КРАСИТЕЛЯМИ

[Успенская А.А.](#)<sup>а</sup>, Мачулкин А.Э.<sup>а</sup>, Шафиков Р.Р.<sup>а</sup>, Петров С.А.<sup>а</sup>, Скворцов Д.А.<sup>а</sup>, Нищенко Е.А.<sup>а</sup>, Зык Н.Ю.<sup>а</sup>, Абакумов М.А.<sup>б</sup>, Польшаков В.И.<sup>а</sup>, Ерофеев А.С.<sup>а</sup>, Горелкин П.В.<sup>а</sup>, Белоглазкина Е.К.<sup>а</sup>, Хазанова Е.С.<sup>в</sup>, Мажуга А.Г.<sup>а,г</sup>

<sup>а</sup>МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, 119234 Москва, Россия,  
e-mail: uspenskaya.n@gmail.com

<sup>б</sup>НИТУ «МИСИС», 119049, Москва, Россия

<sup>в</sup>Изварино Фарма, 119027, Московская обл., Россия

<sup>г</sup>РХТУ имени Д. И. Менделеева, 125047, Москва, Россия

Одной из ведущих причин смерти от рака среди мужчин на сегодняшний день является рак предстательной железы. Перспективным белковым маркером для диагностики и лечения данного заболевания является простатический специфический мембранный антиген (ПСМА). Существующие низкомолекулярные лиганды на основе мочевины, обеспечивают селективное связывание с ПСМА, что позволяет создавать высокоэффективные диагностические конъюгаты.

Установлено, что одной из наиболее подходящих структур линкера для повышения аффинности являются дипептидные цепочки на основе фенилаланина и тирозина. Была синтезирована серия лигандов с дипептидными линкерами смешанной конфигурации и заместителями в ароматическом кольце. Для новой серии лигандов проведены *in vitro* исследования аффинности к ПСМА.

На основе лиганда с дипептидной цепочкой одинаковой конфигурации L-Phe-L-Tyr ( $IC_{50} = 22,5 \pm 6,0$  нМ для LNCaP) была получена серия диагностических конъюгатов с флуоресцентными метками FAM-5, Sulfo-Cy5 и Sulfo-Cy7 которые были исследованы *in vitro* и *in vivo*<sup>1</sup>.

В докладе будут подробно рассмотрены подходы к синтезу данных лигандов и конъюгатов, а также будут приведены результаты биологических исследований.

## Литература

1. Machulkin A. E., Shafikov R. R., Uspenskaya A. A. et al., *J. Med. Chem.* 2021, 64, 8, 4532–4552.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №19-33-90118.*

# РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ СИНТЕЗА НОВЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ, НЕСУЩИХ $\gamma$ -ЛАКТАМНЫЙ ФРАГМЕНТ

**Фаизова Р.Г., Михайлов О.А., Сульдина Д.С., Мызин Н.Г.,  
Лодочникова О.А., Курбангалиева А.Р.**

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
420008, Казань, ул. Кремлевская 18,  
e-mail: RoGFaizova@kpfu.ru*

Ненасыщенные  $\gamma$ -лактамы на протяжении многих лет находятся в фокусе медицинской химии. Фрагмент 3-пирролин-2-она входит в растущее число биологически активных молекул, проявляющих фармацевтически важные свойства. Ранее нами был предложен удобный подход к синтезу 4-арилтиопроизводных 5-гидрокси-3-пирролин-2-она, основанный на реакциях *N*-нуклеофильных реагентов с соответствующими тиоэфирами 5-ал-кокси-2(5*H*)-фуранонов. Целью данной работы явилась разработка препаративных методов синтеза новых функциональных производных 3-пирролин-2-она из 5-метоксифуранона и аминоспиртов, синтез конденсированных *N,O*-гетероциклов на их основе, а также исследование реакционной способности бициклов по отношению к магнийорганическим реагентам.

При аминировании моно- и дитиопроизводных 5-метокси-2(5*H*)-фуранона с помощью аминоспиртов (аминоэтанол, аминопропанол, (*R*)- и (*S*)-фенилглицинолы, (1*S*,2*R*)-аминоинданол) получены новые тиоэфиры 5-гидрокси-3-пирролин-2-она. Кислотно-катализируемые реакции внутримолекулярной дегидратации последних привели к конденсированным би-, три- и тетрациклическим соединениям, молекулы которых содержат ненасыщенный  $\gamma$ -лактамный фрагмент. Изучены реакции нуклеофильного алкилирования бициклов различными реагентами Гриньяра, единственными продуктами явились новые 2,5-дизамещенные производные пиррола.

Разработаны методы селективного окисления тиоэфиров на базе бициклов, в результате получены энантиомерно чистые сульфоны и сульфоксиды данных *N,O*-гетероциклов. Сульфинильные производные демонстрируют выраженную активность в отношении клеток золотистого стафилококка. Строение всех новых соединений охарактеризовано методами спектроскопии ИК, ЯМР, молекулярная и кристаллическая структура ряда гетероциклов охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа.

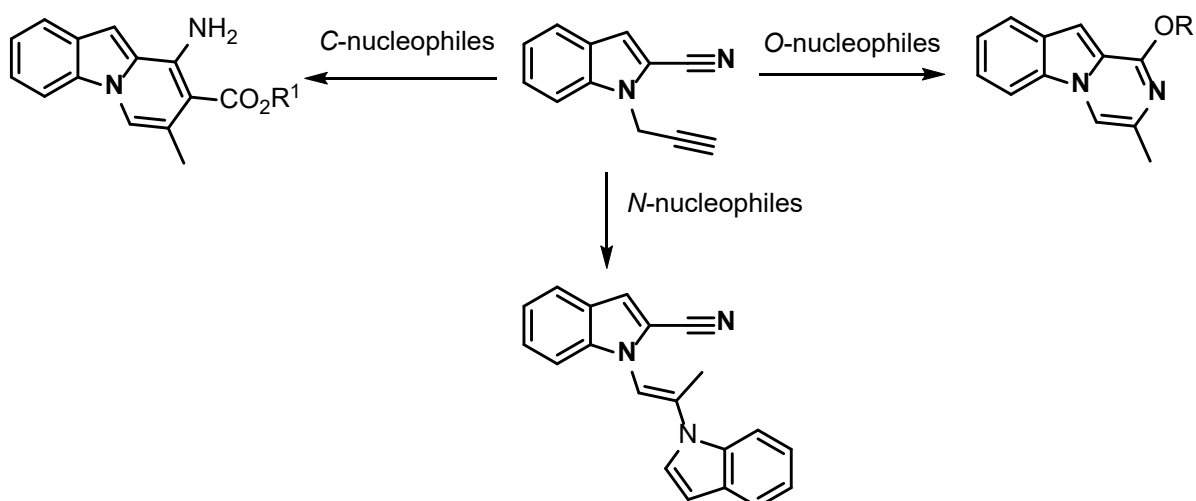
*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности № 0671-2020-0063*

# ДОМИНО-РЕАКЦИИ N-(ПРОПАРГИЛ)ИНДОЛ-2-КАРБОНИТРИЛОВ

[Феста А.А.](#), Залте Р.Р., Бондарев В.Л., Воскресенский Л.Г.

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия  
e-mail: festa\_aa@pfur.ru

*N*-(Пропаргил)индол-2-карбонитрилы могут выступать в качестве ценных прекурсоров для получения аннелированных индолов. В настоящей работе нами были изучены их реакции с различными *O*-, *C*- и *N*-нуклеофилами. Оказалось, что ценные гетероциклические продукты - пиазино[1,2-*a*]индолы, могут быть получены в реакциях со спиртами [1]. Контрольные эксперименты показывают, что реакция начинается с алкин-алленовой перегруппировки, за которой следует образование имидата. Нуклеофильная циклизация имидата по алленовому фрагменту завершает последовательность. При взаимодействии с такими *C*-нуклеофилами, как нитрометан или диэтилмалонат наблюдается образование другой гетероциклической системы – пиридо[1,2-*a*]индолов [2]. При использовании *N*-нуклеофилов реакция останавливается на продуктах гидроаминирования алленов.



## Литература

- [1] A.A. Festa, R.R. Zalte, N.E. Golantsov, A.V. Varlamov, E. V. Van der Eycken, L.G. Voskressensky. *J. Org. Chem.*, **2018**, 83 (16), 9305–9311  
[2] R.R. Zalte, A.A. Festa, N.E. Golantsov, K. Subramani, V.B. Rybakov, A.V. Varlamov, R. Luque, L.G. Voskressensky. *Chem. Commun.*, **2020**, 56, 6527–6530

Работа поддержана Программой стратегического академического лидерства РУДН. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Москвы по проекту № 21-33-70007.

# ОПТИЧЕСКИ ЧИСТЫЕ ГЕТЕРОЦИКЛЫ НА ОСНОВЕ 2(5H)-ФУРАНОНА, МОНО- И ДИТИОЛОВ: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ СВОЙСТВА

Хабибрахманова А.М., Раббаниева Э.С., Шарафутдинов И.С.,  
Лодочникова О.А., Каюмов А.Р., Курбангалиева А.Р.

Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
420008, Казань, ул. Кремлевская 18,  
e-mail: AMHabibrahmanova@kpfu.ru

Пятичленный кислородсодержащий фрагмент 2(5H)-фуранона привлекает внимание исследователей благодаря присутствию в природных соединениях, высокой реакционной способности и проявлению ненасыщенными  $\gamma$ -лактонами широкого спектра биологически активных свойств. Данная работа посвящена разработке методов синтеза оптически чистых серосодержащих гетероциклов ряда 2(5H)-фуранона.

При взаимодействии 3,4-дигалоген-5-гидрокси-2(5H)-фуранонов с *l*- и *d*-ментолами и *l*-борнеолом выделены соответствующие ментилловые и борнилловые эфиры в виде индивидуальных стереоизомеров. Полученные соединения в реакциях с тиофенолами привели к образованию 4-арилсульфанилфуранонов. Разработаны методы селективного окисления арилтиоэфиров фуранонового ряда до хиральных сульфонов и сульфоксидов. Получены новые конденсированные серосодержащие бициклы на основе 2(5H)-фуранона, этандитиола и терпеновых спиртов, которые окислены до моносulfоксидов. В реакциях 5-ментилокси- и 5-борнилоксифуранонов с этан- и пропандитиолами в условиях основного катализа выделены бис-тиоэфиры, несущие два фрагмента 2(5H)-фуранона, а на их основе синтезированы хиральные дисульфоны. Среди новых синтезированных производных фуранона выявлены соединения с выраженной антибактериальной активностью<sup>1</sup>. Высказано предположение о возможном молекулярном механизме действия фуранонов на клетки бактерий<sup>2</sup>.

## Литература

1. Sharafutdinov I.S., Trizna E.Y., Baidamshina D.R., Ryzhikova M.N., Sibgatullina R.R., Khabibrakhmanova A.M., Latypova L.Z., Kurbangalieva A.R., Rozhina E.V., Klinger-Strobel M., Fakhrullin R.F., Pletz M.W., Bogachev M.I., Kayumov A.R., Makarewicz O. *Frontiers in Microbiology*, 2017, **8**, Art. № 2246.
2. Sharafutdinov I.S., Pavlova A.S., Akhatova F.S., Khabibrakhmanova A.M., Rozhina E.V., Romanova Y.J., Fakhrullin R.F., Lodochnikova O.A., Kurbangalieva A.R., Bogachev M.I., Kayumov A.R. *International Journal of Molecular Sciences*, 2019, **20**, Art. № 694.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности № 0671-2020-0063.

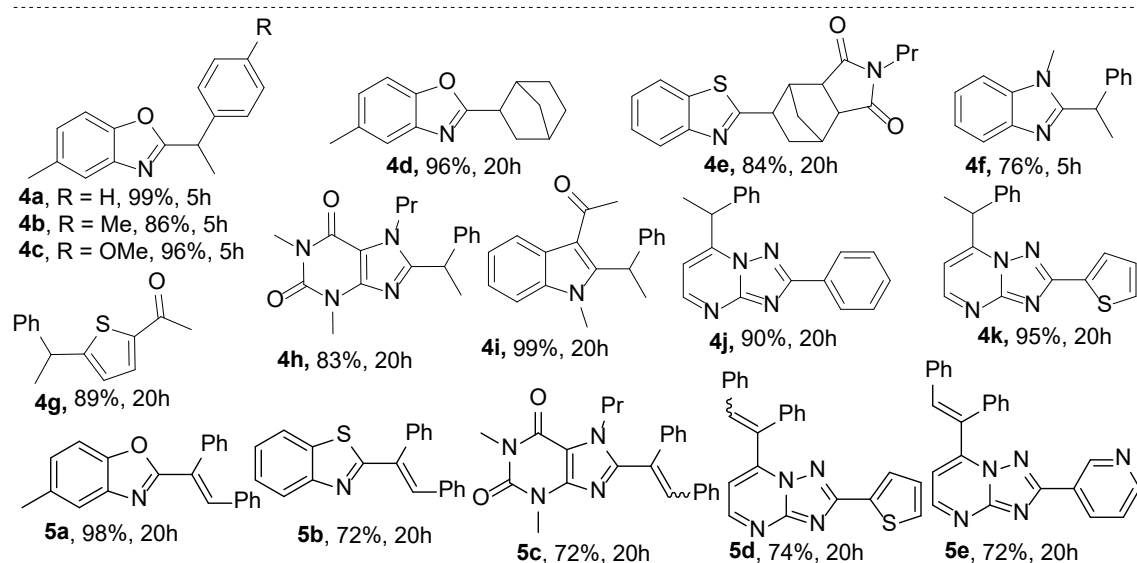
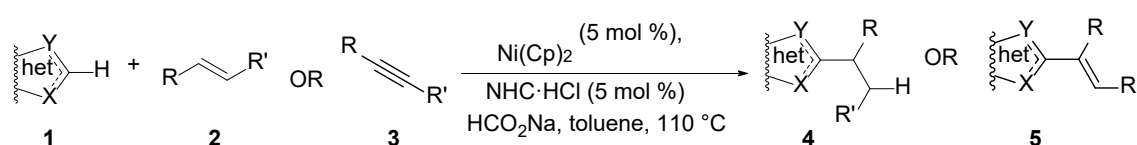
# НОВАЯ КАТАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА NiCp<sub>2</sub>-NHC•HCl-HCO<sub>2</sub>Na ДЛЯ АЛКИЛИРОВАНИЯ И АЛКЕНИЛИРОВАНИЯ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

**Хазипов О.В.,<sup>a</sup> Шепеленко К.Е.,<sup>a</sup> Пасюков Д.В.,<sup>a</sup> Солиев С.Б., Чесноков В.В.,<sup>a</sup>  
Чернышев В.М.,<sup>a</sup> Анаников В.П.<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)  
имени М.И. Платова, Новочеркасск, 346428, e-mail: hazipov@bk.ru

<sup>b</sup>Институт Органической Химии им.Н.Д.Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47

Нами разработана простая каталитическая система алкилирования и алкенилирования гетероароматических соединений алкенами и внутренними алкинами<sup>1</sup>.



Основной особенностью найденной каталитической системы является получение катализатора Ni/NHC *in situ* из таких легкодоступных и стабильных реагентов, как HCO<sub>2</sub>Na, Ni(Cp)<sub>2</sub> и NHC•HCl. Универсальность каталитической системы показана на широком спектре субстратов. Предложенный подход позволяет исключить использование нестабильного Ni(COD)<sub>2</sub> на стадии генерирования никелевых катализаторов.

## Литература

1. Khazipov O.V., Shepelenko K.E., Pasyukov D.V., Chesnokov V.V., Soliev S.B., Chernyshev V.M., Ananikov V.P. *Org. Chem. Front.*, 2021, **8**, 2515-2524

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-20085.

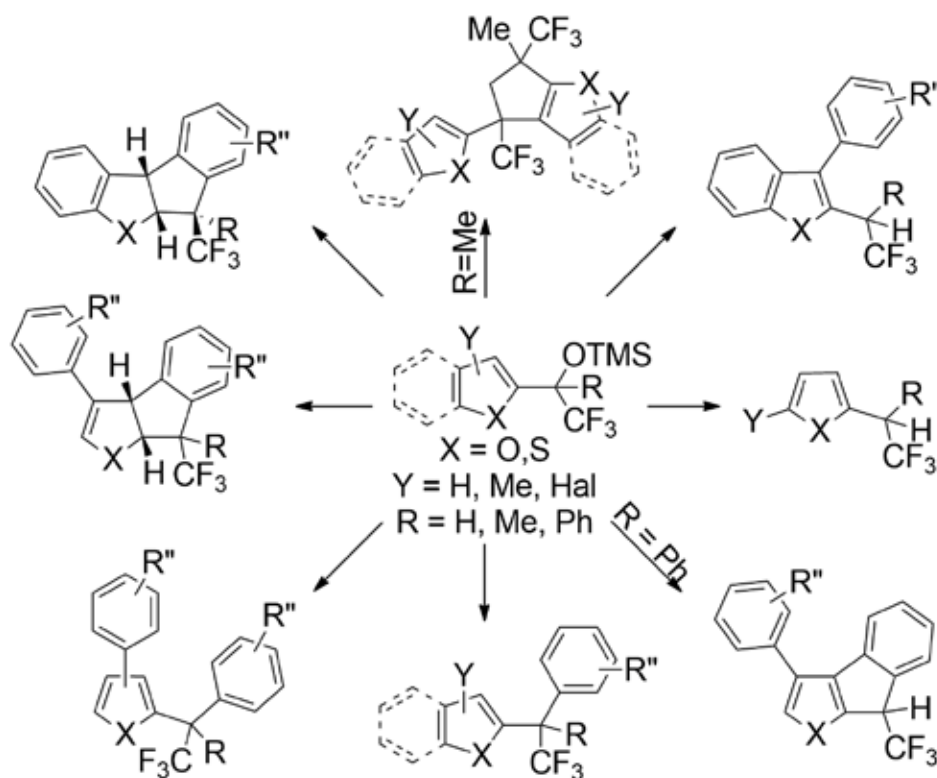
# РЕАКЦИИ ( $\alpha$ -Me<sub>3</sub>SiO-ТРИФТОРАЛКИЛ)-ТИОФЕНОВ И ФУРАНОВ В CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>H

Хорошилова О.В.,<sup>а</sup> Васильев А.В.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Институт Химии,  
198504, Санкт-Петербург, Университетский проспект 26,  
e-mail: o\_khorosh@mail.ru

<sup>б</sup>Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет,  
194021, Санкт-Петербург, Институтский пер. 5

Разработка новых методов синтеза и модификации фторсодержащих пятичленных гетероциклов тиофенового и фуранового ряда на сегодняшний день является актуальной задачей в химии и медицине в связи с активным использованием в качестве лекарственных препаратов как гетероциклических, так и фторсодержащих органических соединений<sup>1,2</sup>.



Реакции ( $\alpha$ -Me<sub>3</sub>SiO-трифторалкил)-тиофенов и фуранов с внутренними и внешними нуклеофилами под действием CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>H являются мощным инструментом органического синтеза и приводят к получению целого ряда новых фторсодержащих гетероциклических соединений, включая продукты моно- и диарилрования гетероциклов, гидрирования боковой цепи, а также различных внутри- и межмолекулярных циклизаций.

## Литература

1. G. A. Patani, E. J. La Voie. *Chem. Rev.*, 1996, **96**, 3147.
2. H. J. Bohm et al. *ChemBioChem.*, 2004, **5**, 637.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 21-13-00006.

# СИНТЕЗ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ N-ОКСИД СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, ОСНОВАННЫЙ НА РЕАКЦИЯХ, ПРОТЕКАЮЩИХ ПО ИЗОЦИКЛИЧЕСКОМУ КОЛЬЦУ БЕНЗОФУРОКСАНА

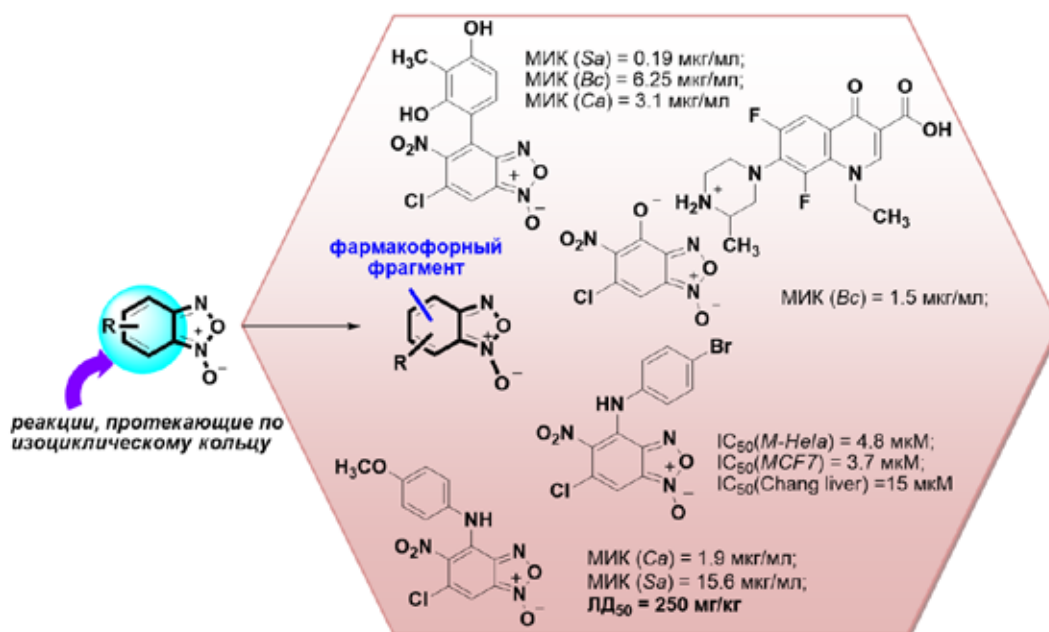
[Чугунова Е.А.](#),<sup>а,б</sup> Бурилов А.Р.,<sup>а,б</sup> Акылбеков Н.И.,<sup>в</sup> Волошина А.Д.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, 420088, Россия, Казань, ул. Академика Арбузова 8,  
e-mail: [chugunova.e.a@gmail.com](mailto:chugunova.e.a@gmail.com);

<sup>б</sup>Лаборатория инфекционных заболеваний растений,  
ФИЦ КазНЦ РАН, 420111, Россия, Казань, Лобачевского 2;

<sup>в</sup>Кызылординский университет им. Коркыт Ата, 120000, Казахстан Кызылорда Айтеке Би 29А

В результате проведенных исследований разработаны и реализованы подходы к созданию новых многофункциональных соединений на бензофуороксановой платформе, содержащих различные фармакофорные фрагменты. Среди синтезированных производных бензофуороксана обнаружены вещества, обладающие цитотоксичностью в отношении опухолевых клеточных линий человека, высокой фунгицидной и бактерицидной активностями; отсутствие при этом у исследованных соединений гемолитической активности, генотоксичности и низкая токсичность делает их перспективными для создания на их основе лекарственных препаратов. Соединения-лидеры, проявившие наиболее выраженную и пролонгированную фунгистатическую активность отношении грибов *Microdochium nivale* и *Microdochium majus*, вызывающих снежную плесень, проходят полевые испытания.



Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Минобрнауки России (Соглашение № 075-15-2019-1881, от 02.12.2019 г.).



# ПОИСК НОВЫХ БИОАКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ МОДИФИКАЦИИ ФТОРИРОВАННЫХ АНТИПИРИНОВ ПО АТОМУ С4

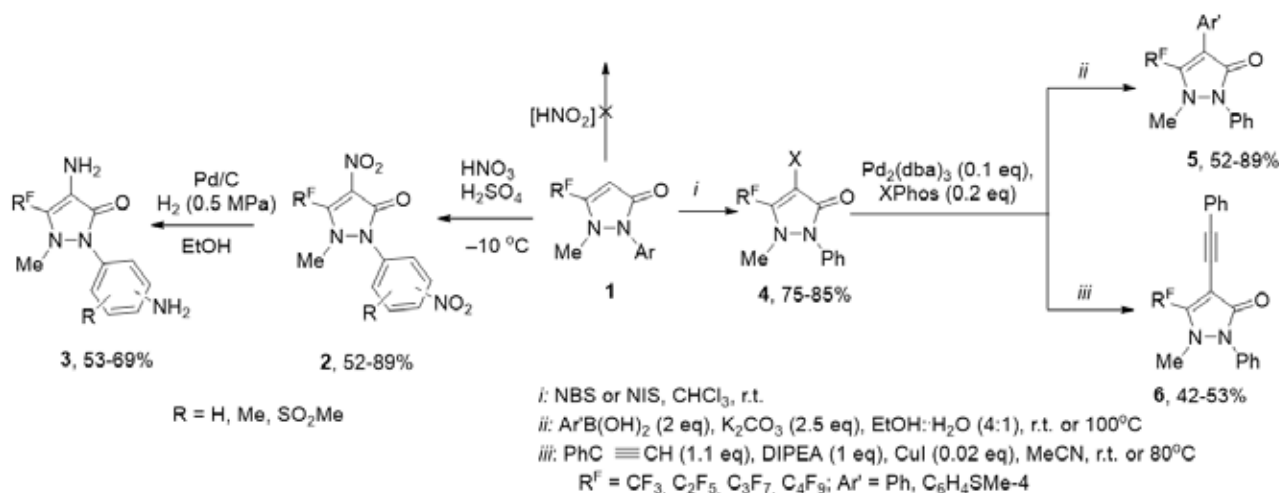
**Щегольков Е.В.,** Агафонова Н.А., Мацнева Д.А.,  
Бургарт Я.В., Салютин В.И.

*Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,  
620990, Екатеринбург, С. Ковалевской, 22,  
e-mail: schegolkov@ios.uran.ru*

Предложены пути модификации ранее обнаруженных перспективных анальгетиков полифторалкил-содержащих антипиринов по атому С4. Следует отметить, что фторированный заместитель дезактивирует данное положение, в результате чего, характерные реакции для нефторированного антипирина (например, нитрозирование) не проходят. Однако нам удалось провести реакцию нитрования по атому С4 антипирина **1** под действием смеси  $\text{HNO}_3/\text{H}_2\text{SO}_4$  с образованием 4-нитроантипирин **2**. При этом соединения **1** с N-фенильным или толилным заместителем нитруются по двум центрам (С4 пиразольного цикла и *para*- или *ortho*-положению арильного фрагмента). Только антипирин **1**, имеющий  $\text{SO}_2\text{Me}$  заместитель в арильном остатке, подвергается *моно*нитрованию по атому С4. Восстановление нитроантипирин **2** водородом приводит к предшественникам анальгина 4-аминоантипирин **3**.

Также проведена функционализация положения С4 антипирина **1** путем введения галогена с помощью N-бром- (NBS) или N-йод-сукцинимид (NIS) с образованием соответствующих 4-галоген-5- $\text{R}^{\text{F}}$ -антипирин **4**, которые открывают широкие возможности по их модификации с помощью металл-катализируемых реакций кросс-сочетания. Проведена серия реакций Сузуки и Соногаширы соединений **4** с арилбороновыми кислотами и фенилэтиленом, соответственно. Подобраны оптимальные условия реакций кросс-сочетания, что позволило получить широкий ряд 4-арил-5-(полифторалкил)-антипирин **5** и 5-(полифторалкил)-4-(фенилэтинил)-антипирин **6**.

В докладе также обсуждается использование синтезированных продуктов в качестве биоактивных соединений.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-13-00390.

# СТЕРЕОЭЛЕКТРОННЫЙ КОНТРОЛЬ В СИНТЕЗЕ КАРКАСНЫХ ПЕРОКСИДОВ

Ярёменко И.А., Белякова Ю.Ю., Радулов П.С., Терентьев А.О.

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского  
Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: yaremenko@ioc.ac.ru

Органические пероксиды являются объектами интенсивных исследований химиков и фармакологов для разработки на их основе новых лекарственных средств. Артемизинин, его производные и синтетические аналоги являются важными противомаларийными препаратами. Обнаружено, что синтетические пероксиды способны ингибировать как  $\alpha$ -коронавирус NL63,  $\beta$ -коронавирус OC43, так и SARS-CoV-2.<sup>1</sup>

В цикле работ нашей группы разработан подход к синтезу каркасных пероксидов из трикетонов и пероксида водорода. Предложены правила их сборки. Показано, что стереоэлектронные эффекты в промежуточных оксикарбениевых и пероксикарбениевых катионах и переходных состояниях определяют селективность данной реакции.<sup>2</sup>

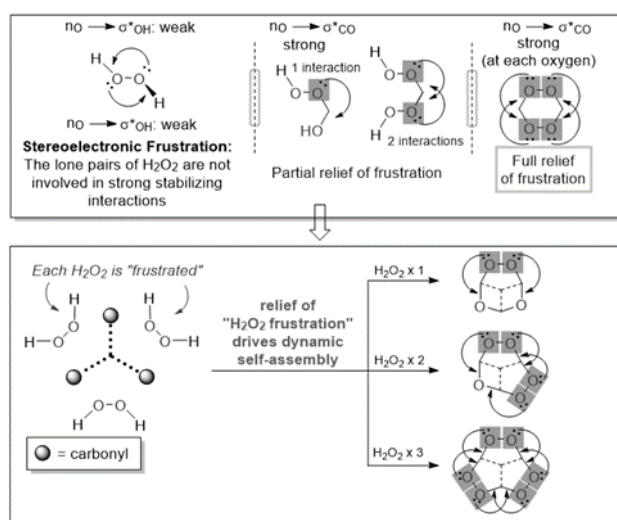


Рисунок 1. Стереоэлектронный контроль в синтезе каркасных пероксидов

## Литература

1. A.K. Ghosh, H. Miller, K. Knox, M. Kundu, K.J. Henrickson, and R. Arav-Boger *ACS Infect. Dis.* **2021**, DOI 10.1021/acsinfecdis.1c00053
2. I.A. Yaremenko, P. S. Radulov, M. G. Medvedev, Nikolai V. Krivoschchapov, Yu. Yu. Belyakova, R. A. Novikov, A.A. Korlyukov, A.I. Ilovaisky, A. O. Terent'ev, and I. V. Alabugin *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142, 34, 14588-14607

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-13-00205.



# ПОСТЕРНЫЕ ДОКЛАДЫ

# ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ БИС-ГУАНИДИНОВ

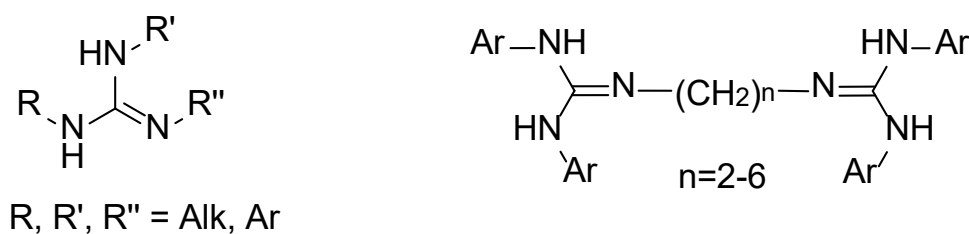
**Абрамов В.А., Лемпорт П.С., Ненайденко В.Г.**

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3.  
e-mail: lemport.pavel@yandex.ru*

Гуанидины являются одними из самых интересных, привлекательных, ценных и универсальных органических молекул - от супероснований, способных катализировать органические реакции на основе оснований, до универсальных наборов лигандов для использования в координационной и медицинской химии.<sup>1</sup>

В настоящей работе на основе известных методик<sup>2,3</sup> нами с выходами до 98% нами была синтезирована широкая библиотека гуанидиновых оснований, которые отличались природой и строением заместителей в гуанидиновом ядре (рис. 1, слева).

Оптимизация условий синтеза и контроль над протеканием основного процесса позволил нам получить более сложные структурные представители гуанидиновых оснований, в частности, бис-гуанидины, синтез которых к настоящему времени практически не изучен (рис. 1, справа)



*Рисунок 1. Общие структурные полученных гуанидиновых оснований*

Полученные в ходе данной работы соединения предполагается исследовать в качестве эффективных экстрагентов пертехнетат-иона из радиоактивных отходов атомной энергетики.<sup>4</sup>

## Литература

1. Alonso-Moreno C., Antiñolo A., Carrillo-Hermosilla F., Otero A., *Chem. Soc. Rev.*, 2014, **43**, 3406
2. Ramadas K., Janarthanan N., Pritha. A. *SYNLETT*, **1997**, 1053.
3. Sirilak W., Mookda P., Wong P. *SYNLETT*, **2016**, 1121.
4. Герман К. Э. *Вестник Атомпрома: Материаловедение*, 2019, **5**, 26.

# СИНТЕЗ 1-БУТИЛ-3,6-ДИАЗАГОМОАДАМАНТАНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

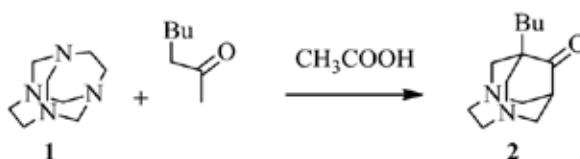
[Аласади Рахман Тама](#)<sup>1</sup>, Аль-Обайди Надир Джассим<sup>2</sup>

<sup>1</sup> University of Kerbala, Kerbala, Iraq

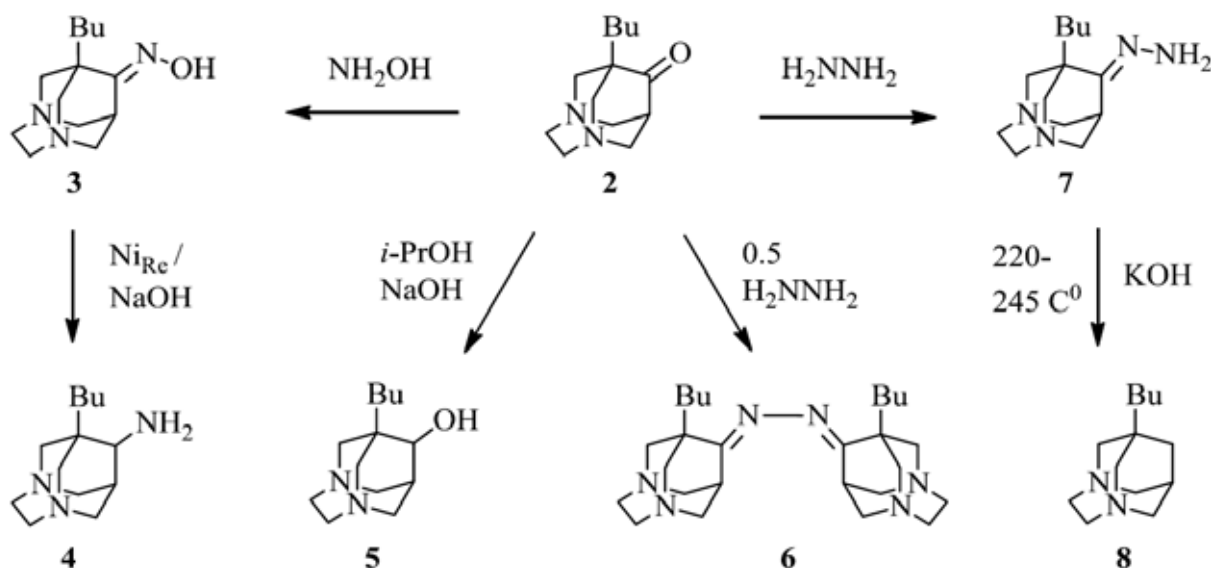
<sup>2</sup> University of Mustansiriyah, Baghdad, Iraq

e-mail: [orgrahman00@yahoo.com](mailto:orgrahman00@yahoo.com), [Rahman@uokerbala.edu.iq](mailto:Rahman@uokerbala.edu.iq)

Конденсация тетраметилэтилендиэтилтетрамина **1** [1] с 2-гептанонем в кипящем изопропиловом спирте в присутствии уксусной кислоты приводит к образованию 1-бутил-3,6-диазагомоадамантан-9-она **2**.



Действием на кетон **2** гидроксиламином получен оксим 1-бутил-3,6-диазагомоадамантан-9-она **3** восстановленный сплавом никеля с алюминием (50 × 50) (сплав Ренея) в водно-щелочной среде в 1-бутил-3,6- диазагомоадамантан-9-амин **4**. Восстановлением кетон **2** путем нагревания в течение 3.5 ч в изопропиловом спирте в присутствии щелочи получены 1-бутил-3,6- диазагомоадамантан-9-ол **5**. Кетон **2** был восстановлен в 1-бутил-3,6-диазагомоадамантан **8** через гидразон 1-бутил-3,6-диазагомоадамантан-9-она **7** по Кижнеру-Вольфу, также был получен азин **6** при использовании половина эквивалента гидразин гидрата.



## Литературы

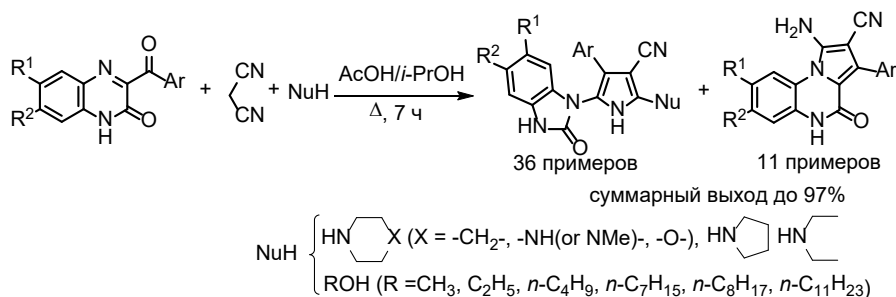
1. Р. Т. Аласади, А. Х. А. Аль-Ясари, Х. Ф. Абдулхасана, В. В. Калашников, Т. М. Серов, Т. М. Серова. *ЖорХ.* **2019**, 55,427-432.

# НОВАЯ ТРЁХКОМПОНЕНТНАЯ ДОМИНО-РЕАКЦИЯ ДЛЯ СИНТЕЗА ПИРРОЛОВ

[Алгаева Н.Э.](#), Хафизова Е.А., Латыпов Ш.К., Сияшин О.Г., Мамедов В.А.

*Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова,  
Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук»,  
Российская Федерация, 420088 Казань, ул. Акад. Арбузова, 8.  
e-mail: natali.algaeva.95@inbox.ru*

Разработана трёхкомпонентная (3-ароилхиноксалин-2-он, малонитрил и вторичный циклический амин (или первичные спирты)) домино-реакция в качестве альтернативного метода синтеза би- и три-гетероциклических конденсированных пирролов<sup>1</sup>. Варьированием заместителей в 3-ароилхиноксалин-2-онах, вторичных циклических аминах (включая пиперидин, морфолин, пиперазин, пирролидин) и первичных спиртах получены различные производные пирролов. Кроме того, варьирование заместителей позволило выявить конкурирующее направление, протекающее через хиноксалинон-бензимидазольную перегруппировку (перегруппировку Мамедова типа II)<sup>2</sup>, приводящее к 5-(бензимидазол-2(3*H*)-он-1-ил)пирролокарбонитрилам. Ещё одним конкурирующим направлением реакции стало внутримолекулярное пирроло[*a*]аннелирование, ведущее к различнозамещённым конденсированным пирролам. Новый подход к построению функционализированных пирролов значительно расширяет библиотеку этого важного класса соединений и обеспечивает современный подход к конструированию соединений такого типа.



## Литература

- Mamedov, V.A., Khafizova E.A., Algaeva N.E., Latypov Sh.K., Sinyashin O.G. *J. Org. Chem.* 2020, **85**, 9887–9904.
- Mamedov, V.A., Zhukova, N.A. *Synthesis* 2021, **53**, 1849–1878.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 18-13-00315)*

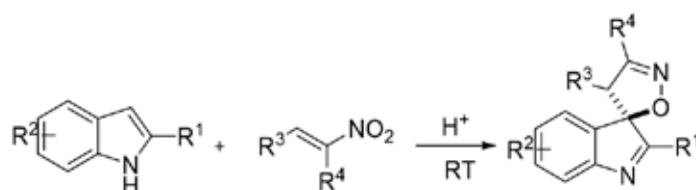
*Физико-химические исследования проведены в ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН*

## НОВЫЕ ПУТИ ПОЛУЧЕНИЯ СПИРО[ИНДОЛ-3,5'-ИЗОКСАЗОЛОВ]

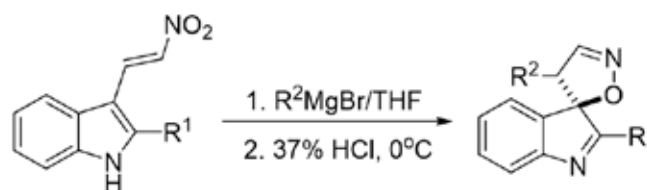
[Александрова Е.В.](#), Аксенов Д.А., Аксенов Н.А., Аксенов А.В., Скоморохов А.А.

Северо-Кавказский федеральный университет, 355009, Ставрополь, ул. Пушкина, 1а  
 e-mail: elena.aleksandrova1607@gmail.com

Гетероциклы с фрагментом 4'-H-спиро[индол-3,5'-изоксазола] находятся в центре внимания нашей исследовательской группы на протяжении многих лет, по причине того, что синтетические препараты на основе этих молекул, могут демонстрировать многообещающую биологическую активность. В итоге научных исследований был разработан метод синтеза 4'-H-спиро[индол-3,5'-изоксазолов]<sup>1</sup> на основе реакции формального [4+1]-циклоприсоединения нитроалкенов к индолам. Некоторые из этих спироциклических молекул проявили противораковую активность.



Для расширения списка спирогетероциклов, были проведены исследования в разработке нового подхода<sup>2</sup> – *one-pot*, сочетающий добавление реактива Гриньяра к 3-(2-нитровинил)-1H-индолам и последующую спироциклизацию кислотой Бренстеда. Новая методика позволила также получить и труднодоступные другими способами 4-алкилзамещенные производные.



### Литература

1. Aksenov A.V., Aksenov D.A., Arutiunov N.A., Aksenov N.A., Aleksandrova E.V. and Michael Rubin. Synthesis of spiro[indole-3,5'-isoxazoles] with anticancer activity via a formal (4+1)-spirocyclization of nitroalkenes to indoles, *J. Org. Chem.*, 2019, **84**, 7123–7137.
2. Aksenov A.V., Aksenov D.A., Aksenov N.A., Skomorokhov A.A., Aleksandrova E.V. and Michael Rubin. Preparation of spiro[indole-3,5'-isoxazoles] via Grignard conjugate addition/spirocyclization sequence, *RSC Adv.*, 2021, **11**, 1783-1793.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (Грант № 21-73-20051) и Министерства образования и науки Российской Федерации (тема 0795-2020- 0031).



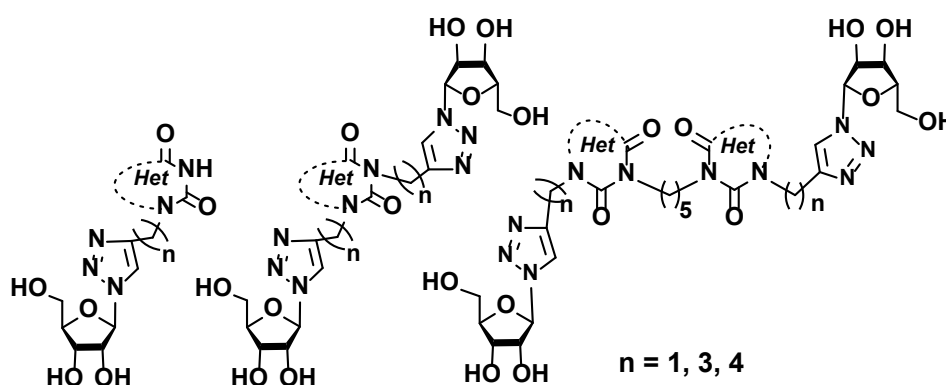
# НОВЫЕ 1,2,3-ТРИАЗОЛОВЫЕ АНАЛОГИ ПИРИМИДИНОВЫХ НУКЛЕОЗИДОВ. СИНТЕЗ И ПРОТИВОВИРУСНАЯ АКТИВНОСТЬ

[Андреева О.В.](#)<sup>1</sup>, Беленок М.Г.<sup>1</sup>, Сайфина Л.Ф.<sup>1</sup>, Шулаева М.М.<sup>1</sup>, Гарифуллин Б.Ф.<sup>1</sup>, Зарубаев В.В.<sup>2</sup>, Слита А.В.<sup>2</sup>, Есаулкова ЯЛ.<sup>2</sup>, Семенов В.Э.<sup>1</sup>, Катаев В.Е.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, г. Казань, ул. Академика Арбузова, дом 8, [ovandreeva76@mail.ru](mailto:ovandreeva76@mail.ru)

<sup>2</sup>ФБУН НИИ эпидемиологии и микробиологии имени Пастера, Санкт-Петербург, ул. Мира, д. 14

Нуклеозиды - одна из самых продуктивных платформ для создания терапевтических агентов с высокой физиологической активностью. На сегодняшний день синтезированы сотни аналогов нативных нуклеозидов, ингибирующих репликацию различных вирусов. Нами впервые синтезированы 1,2,3-триазоловые аналоги пириимидиновых нуклеозидов, в которых в качестве гетероциклического фрагмента использованы урацил, тимин, 6-метилурацил, 3,6-диметилурацил, аллоксазин и хиназолин-2,4-дион. Синтезированы соединения с одним и двумя гетероциклическими и 1,2,3-триазол-4-ил-b-D-рибозильными фрагментами



Тестирование противовирусной активности синтезированных соединений выявило соединения-лидеры, ингибирующие репликацию вируса гриппа А (H1N1) при  $IC_{50}$  5–18 мкг/мл, а репликацию вируса Коксаки В3 при  $IC_{50}$  4,4–12 мкг/мл.

Проведено компьютерное моделирование взаимодействия соединений лидеров с активным сайтом РНК-зависимой РНК полимеразы вируса гриппа А (H1N1) и оболочкой вируса Коксаки В3.

Исследование проведено при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-13-00003)

# ДИАРИЛИДОНИЕВЫЕ СОЛИ КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ ОРТО-ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ АЗОЛИЛБЕНЗОЛОВ

**Антонкин Н.С., Власенко Ю.А.**

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»,  
 Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина 30, nsa14@tpu.ru

Производные орто-замещенных азолилбензолов являются важными структурными элементами биологически активных веществ (БАВ), в том числе перспективных противовирусных агентов (**1**)<sup>1</sup> и антибактериальных препаратов для терапии таких заболеваний как болезнь Шагаса (**2**)<sup>2</sup> (Рис. 1).

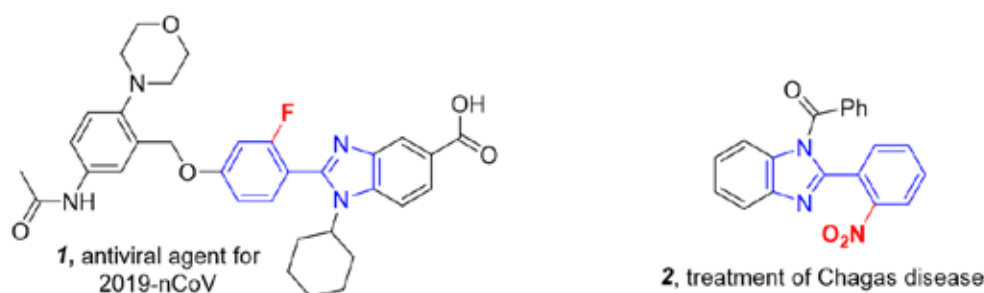


Рисунок 1. Представители БАВ, содержащих в структуре 2-азолилбензол.

Известные методы прямой орто-функционализации подразумевают катализ солями тяжелых металлов, а также в большинстве случаев, высокие температуры (>120°C)<sup>3</sup>. В данной работе нами представлен подход к прямой орто-функционализации азолилбензолов с использованием диарилиодониевых солей в отсутствие переходных металлов (Рис. 2).

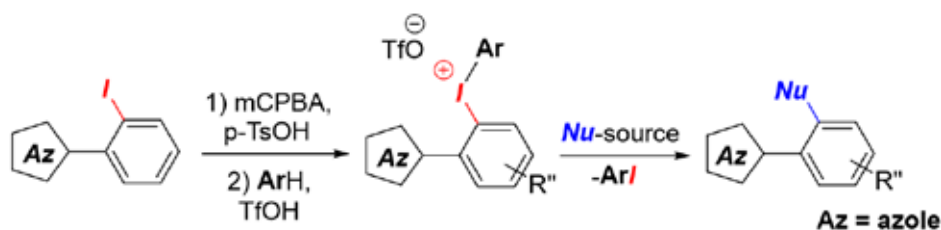


Рисунок 2. Общая схема функционализации

## Литература

- [1] Tonelli, F.; Mazzei, T.; Novelli, A.; Mazzoni, P.; Ficari, F.; Group, T.I.C., *J. Chemother.* **2002**, 14(4), 366.
- [2] Beltran-Hortelano, I.; Alcolea, V.; Font, M.; Pérez-Silanes, S., *Eur. J. Med. Chem.* **2020**, 206, 112692.
- [3] Saha, M.; Das, A.R., *Org. Biomol. Chem.*, **2020**, 18, 941.

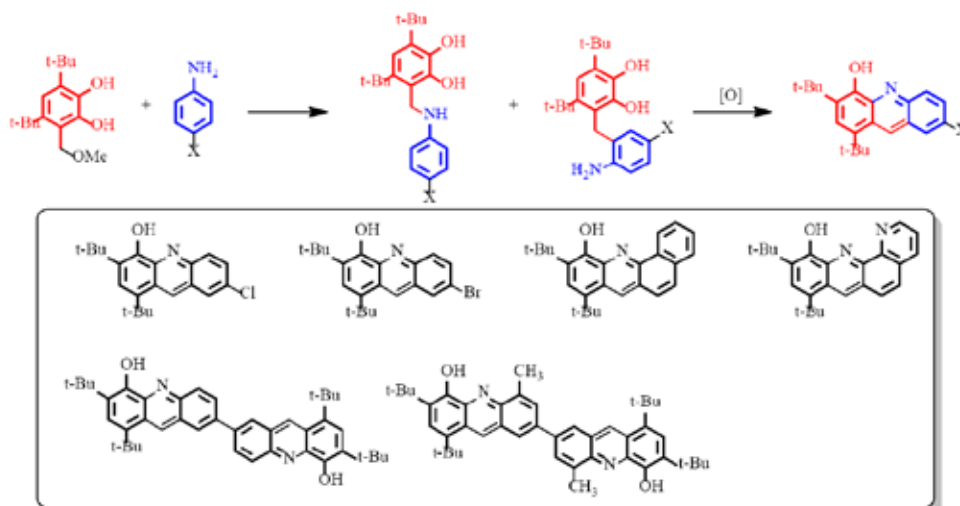
Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Томской области в рамках научного проекта № 19-43-70300

# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭКРАНИРОВАННЫХ АКРИДИН-4-ОЛОВ

[Арсеньев М.В.](#)

*Институт металлоорганической химии им. Г. А. Разуваева Российской академии наук,  
Российская Федерация, 603950 Нижний Новгород, ул. Тropicина, 49,  
e-mail: mars@iomc.ras.ru*

Прекурсоры функционализированных *o*-хинонметидов являются удобными и селективными агентами при синтезе органических соединений различного назначения. Нами рассматривается возможность использования пространственно-экранированных пирокатехинов<sup>1</sup> в качестве источника *o*-хинонметида и возможности синтеза на его основе новых ингибиторов радикальных процессов, компонент фотоницирующих систем<sup>2</sup>, экстрагентов и др. Показано, что нагревание 3,5-ди-*трет*-бутил-6-метоксиметилпирокатехина с анилинами приводит к получению катехоланилинов, которые при окислении трансформируются в пространственно-экранированные акридин-4-олы<sup>3</sup> – новые хорошо растворимые в органических растворителях лиганды для координационной химии<sup>4</sup>.



## Литература

1. Poddel'sky A.I., Arsenyev M.V., Astaf'eva T.V., Chesnokov S.A., Fukin G.K., Abakumov G.A. *J. Organomet. Chem.*, 2017, **835**, 17.
2. Shurygina M.P., Zakharina M.Yu., Baten'kin M.A., Konev A.N., Shavyrin A.S., Chelnokov E.A., Shushunova N.Yu., Arsenyev M.V., Chesnokov S.A., Abakumov G.A. *Eur. Polym. J.*, 2020, **127**, 109573.
3. Polyakova S.K., Balashova T.V., Rumyantsev R.V., Arsenyev M.V., Fukin G.K., Chesnokov S.A. *Mendeleev Commun.*, 2021, **31**, 262.
4. Balashova T.V., Polyakova S.K., Arsenyev M.V., Ilchev V.A., Kukinov A.A., Marugin A.V., Rumyantsev R.V., Fukin G.K., Yablonskiy A.N., Bochkarev M.N. *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2021, **2021**, 1441.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект №19-73-10173.*

# ПЕРЕГРУППИРОВКА 2-(3-ОКСОИНДОЛИЛ-2-ИЛ)- 2-АРИЛАЦЕТОНИТРИЛОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАФИОЛЕТА

[Арутюнов Н.А.](#), Аксенов Н.А., Аксенов Д.А., Аксенов А.В.

Северо-Кавказский Федеральный Университет,  
355009, Россия, г. Ставрополь,  
ул. Пушкина 1  
E-mail: [naarutiunov@ncfu.ru](mailto:naarutiunov@ncfu.ru)

2-(3-оксоиндолил-2-ил)-2-арилацетонитрилы являются высокореакционноспособными соединениями [1], которые легко перегруппировываются в различных условиях в широкий набор продуктов. В данной работе мы рассматриваем перегруппировку спиро[индол-3,5'-изоксазолов] под действием ультрафиолета в апротонных растворителях (Схема 1)

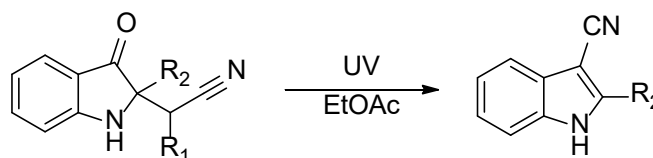


Схема 1. Схема реакции

## Литература

1. Aksenov A. V. et al. Preparation of Stereodefined 2-(3-Oxoindolin-2-yl)-2-Arylacetonitriles via One-Pot Reaction of Indoles with Nitroalkenes //The Journal of organic chemistry. – 2019. – Т. 84. – №. 19. – С. 12420-12429.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 21-73-20051 Дизайн новых химических трансформаций с использованием нитроолефинов в качестве 1,4-диполей и последующее их применение для получения биологически активных препаратов

# РЕГИОСЕЛЕКТИВНЫЙ КАТАЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ АМИНО-АЗОЛОВ

**Астахов А.В., Черненко А.Ю., Шепеленко К.Е., Чернышев В.М.**

«Южно-Российский Государственный политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова»,  
346428, Новочеркасск, ул. Просвещения 132  
chernenko.andrew@mail.ru

Использование металлокомплексного катализа может существенно сократить количество стадий и отходов при получении практически важных азотистых гетероциклов. Однако амино-азолы, с одной стороны, обладают низкой нуклеофильностью, с другой стороны, металлокомплексные катализаторы способны разрушаться в процессе каталитических реакций,<sup>1-3</sup> что приводит к постепенной деактивации каталитической системы, вынуждает использовать повышенные загрузки катализаторов и может способствовать снижению селективности реакции.

Нами разработаны стабильные каталитические системы на основе комплексов N-гетероциклических карбенов с переходными металлами (Ni, Pd, Ru, Cu), позволяющие осуществлять региоселективный синтез практически значимых азотистых гетероциклов, содержащих аминоазольный фрагмент (рис. 1).

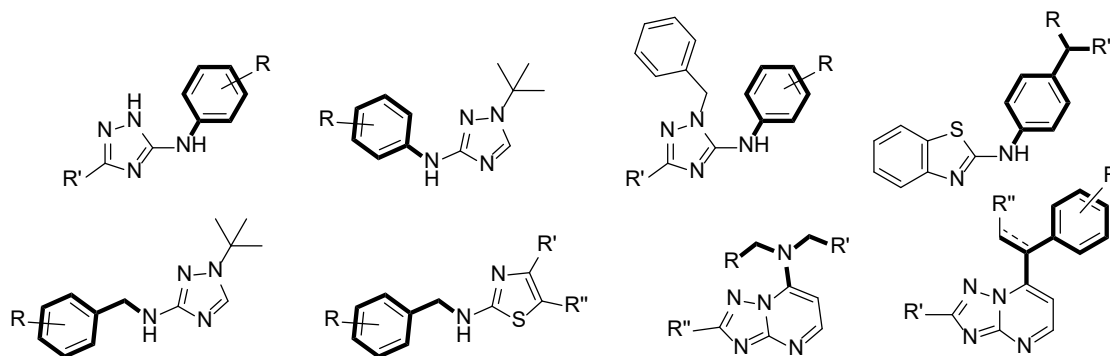


Рисунок 1. Некоторые примеры синтезированных производных амино-азолов в условиях катализа M/NHC комплексами.

## Литература

1. Chernyshev V. M., Khazipov O. V., Shevchenko M. A., Chernenko A. Yu., Astakhov A. V., Eremin D. B., Pasyukov D. V., Kashin A. S. and Ananikov V. P. *Chem. Sci.*, 2018, **9**, 5564.
2. Khazipov O. V., Shevchenko M. A., Chernenko A. Y., Astakhov A. V., Pasyukov D. V., Eremin D. B., Zubavichus Y. V., Khrustalev V. N., Chernyshev V. M., Ananikov V. P. *Organometallics*. 2018. **37**. 1483.
3. Astakhov A. V., Soliev S. B., Gordeev E. G., Chernyshev V. M., Ananikov V. P. *Dalton Transactions*. 2019. **48**. 17052.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-10100

# СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОСТЬ РЕАКЦИИ АМИДОКСИМОВ С АНГИДРИДАМИ ДИКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

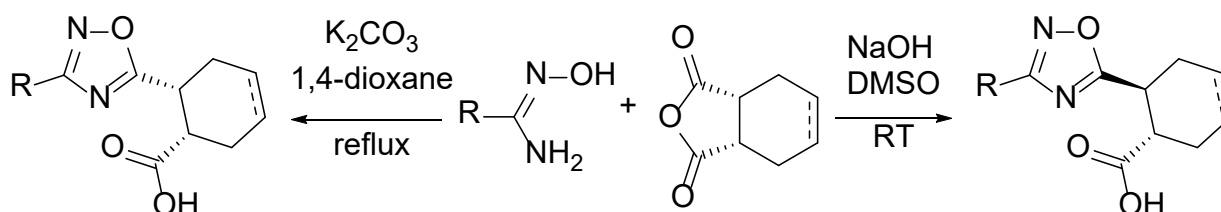
**Байков С.В.,<sup>а</sup> Гейль К.К.,<sup>а</sup> Тарасенко М.В.,<sup>б</sup> Шетнев А.А.<sup>б</sup>**

<sup>а</sup>Санкт-Петербургский государственный университет,  
 198504, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект 26  
 e-mail: s.baykov@spbu.ru

<sup>б</sup>Ярославский государственный педагогический университет имени К. Д. Ушинского,  
 150000, Ярославль, ул. Республиканская 108

В предыдущей работе<sup>1</sup> нами было показано, что пространственное строение продуктов взаимодействия амидоксимов ангидридами норборнанового ряда, определяется основностью среды. В частности, продукты реакции в системе NaOH-DMCO имеют преимущественно *транс*-конфигурацию, тогда как в более мягких условиях ( $K_2CO_3$ , 1,4-диоксан) образуется *цис*-изомер.

В продолжение исследований мы изучили реакцию амидоксимов с ангидридами циклогексан и циклогексен дикарбонновых кислот:



В результате был получен ряд *цис*- и *транс*-изомеров соответствующих оксадиазол-замещённых карбоновых кислот. Рентгеноструктурное исследование синтезированных соединений выявило наличие два типа нековалентных взаимодействий между карбоксильной группой и оксадиазольным циклом.

## Литература

1. Baykov S., Tarasenko M., Zelenkov L.E., Kasatkina S., Savko P., Shetnev A. *European Journal of Organic Chemistry*, 2019, **2019**, 5685.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента РФ (грант МК-1074.2020.3).

# РАЗРАБОТКА НОВЫХ ТИОФЕНСОДЕРЖАЩИХ ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫХ ОЛИГОМЕРОВ РАЗЛИЧНОГО СТРОЕНИЯ: СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ОРГАНИЧЕСКИХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЯХ

**Балакирев Д.О.**,<sup>a</sup> Калиниченко Н.К.,<sup>a</sup> Сухорукова П.К.<sup>a,б</sup>, Свидченко Е.А.<sup>a</sup>, Перегудова С.М.<sup>a,в</sup>, Мананов А.Л.<sup>a,г</sup>, Савченко П.С.<sup>a</sup>, Парашук Д.Ю.<sup>a,г</sup>, Лупоносов Ю.Н.<sup>a</sup>, Пономаренко С.А.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии Наук, 117393, Москва, Профсоюзная 70;*

*e-mail: balakirev@ispm.ru*

<sup>б</sup> *Химический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы 1/3;*

<sup>в</sup> *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук, 119991, Москва, Вавилова 28;*

<sup>г</sup> *Физический факультет и международный учебно-научный лазерный центр, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы 1/62.*

Органическая фотовольтаика является одной из наиболее динамично развивающихся областей органической электроники, а разработка и поиск новых функциональных материалов для органических солнечных батарей (ОСБ) остается крайне актуальной задачей.

В данной работе представлены синтез ряда новых гетероциклических молекул, а именно: сопряженных олигомеров, имеющих в своем строении электронодонорный центральный разветвляющий фрагмент (на основе бензотрииндола, бензодитиофена или олиготиофена), сопряженный с электроноакцепторными (алкилдициановинильными или алкилцианоацетатными) заместителями посредством олиготиофенового спейсерного фрагмента<sup>[1-3]</sup>. Термические, оптические и электрохимические свойства, а также фазовое поведение всех полученных олигомеров были изучены комплексом физико-химических методов. Анализ полученных результатов позволил установить ряд существенных структурно-свойственных закономерностей и их влияние на эффективность фотовольтаических устройств на основе полученных олигомеров.

## Литература

1. Guo J., Balakirev D.O., Gu C., Peregudova S.M., Ponomarenko S.A., Liu Z., Luponosov Yu.N., Min J., Lei A. *Dyes and Pigments*, 2020, **175**, 108078.
2. Balakirev D.O., Luponosov Yu.N., Mannanov A.L., Savchenko P.S., Minenkov Y., Paraschuk D.Yu., Ponomarenko S.A. *Dyes and Pigments*, 2020, **181**, 108523.
3. Kalinichenko N.K., Balakirev D.O., Savchenko P.S., Mannanov A.L., Peregudova S.M., Paraschuk D.Yu., Ponomarenko S.A., Luponosov Yu.N. *Dyes and Pigments*, 2021, **In Press**.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-10198.*



## ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ЛИГАНДОВ РЯДА 2-ПИРИДИЛ-БЕНЗОТИАЗОЛОВ НА СТРУКТУРУ ИХ МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

**Барская Е.С.,<sup>а</sup> Чорбу А.А.,<sup>а</sup> Моисеева А.А.,<sup>а</sup> Абрамович М.С.,<sup>б</sup> Ржеутский А.В.,<sup>а</sup>  
Полякова М.Н.,<sup>а</sup> Григорьев Г.П.,<sup>а</sup> Березина А.В.,<sup>а</sup> Зык Н.В.,<sup>а</sup> Белоглазкина Е.К.<sup>а</sup>**

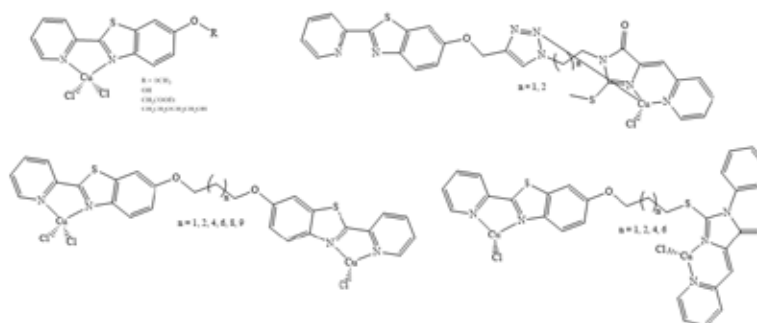
<sup>а</sup> Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,  
119991, Москва, Ленинские горы 1 стр 3,  
e-mail: [elenakovaleva2010@gmail.com](mailto:elenakovaleva2010@gmail.com)

<sup>б</sup> Факультет Наук о Материалах МГУ имени М.В. Ломоносова,  
119991, Москва, Ленинские горы 1 стр 73

На сегодняшний день бензотиазол считается структурным фрагментом, крайне перспективным для разработки лекарственных и диагностических препаратов. К соединениям ряда биензотиазолов относятся Рилузол - наиболее эффективное из зарегистрированных лекарственных средств для терапии латерального амиотрофического склероза, а также флуоресцентные красители тиофлавин S и тиофлавин T способные специфически связываться с амилоидными фибриллами, повышая квантовый выход флуоресценции на три порядка, что используется в разработке флуоресцентного метода диагностики болезни Альцгеймера на их основе.

Помимо биовизуализации и потенциального применения в диагностике, важным фармакологическим свойством 2-арилбензотиазолов является их противоопухолевая активность. Однако ни одно из подобных соединений не прошло III фазу клинических исследований; таким образом, несмотря на фармакофорный потенциал 2-арилбензотиазолов, для успешного использования в медицине необходима их дополнительная модификация. Решением данной проблемы является создание комплексов металлов на основе 2-гетарилбензотиазолов.

В докладе представлен синтез показанных ниже медьсодержащих производных лигандов ряда 2-пиридил-бензотиазола и изучение зависимости координационного окружения и степени окисления меди в полученных комплексах от структуры лигандов.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-29-08007.

# ИЗУЧЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ 3-ОКСИДОВ 1-МЕТИЛИМИДАЗОЛА

**Басанова Е.И.,<sup>а</sup> Никитина П.А.,<sup>а,б</sup> Колдаева Т.Ю.,<sup>а</sup> Первалов В.П.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,  
125047, г. Москва, Миусская пл., д.9,  
e-mail: basanova.elizavetka@mail.ru

<sup>б</sup>Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,  
119334, г. Москва, ул. Вавилова д.28.

Азометины **1-4** были получены для синтеза производных 3-оксида 5-ацетилимидазола взаимодействием соответствующих альдегидов с метиламином (Рис.1).

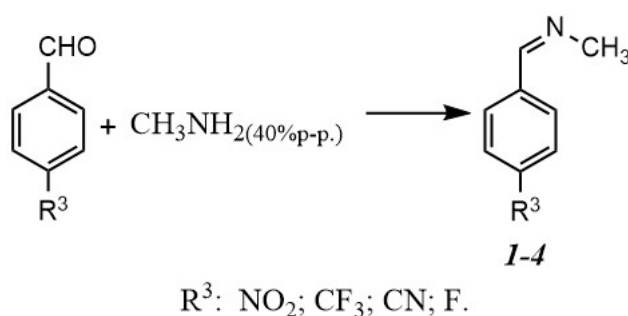


Рисунок 1. Схема синтеза азометинов 1-4.

В результате реакции конденсации оснований Шиффа **1-4** с монооксимами **5-6** были выделены производные 3-оксида 1-метилимидазола **7-14** (Рис. 2).

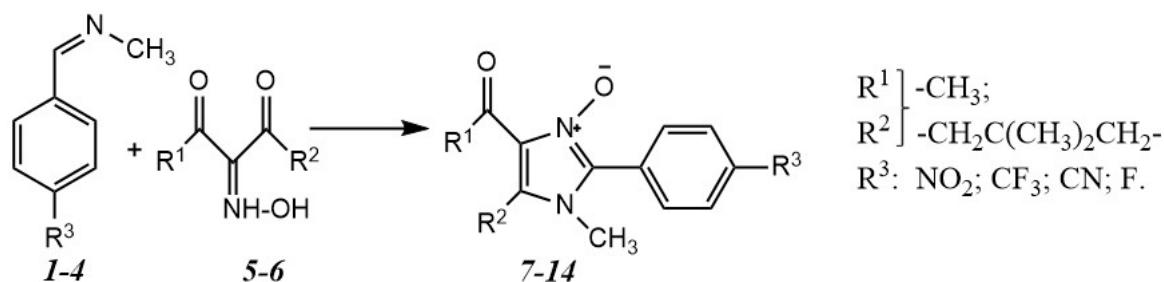


Рисунок 2. Схема синтеза 3-оксидов 1-метилимидазола 7-14.

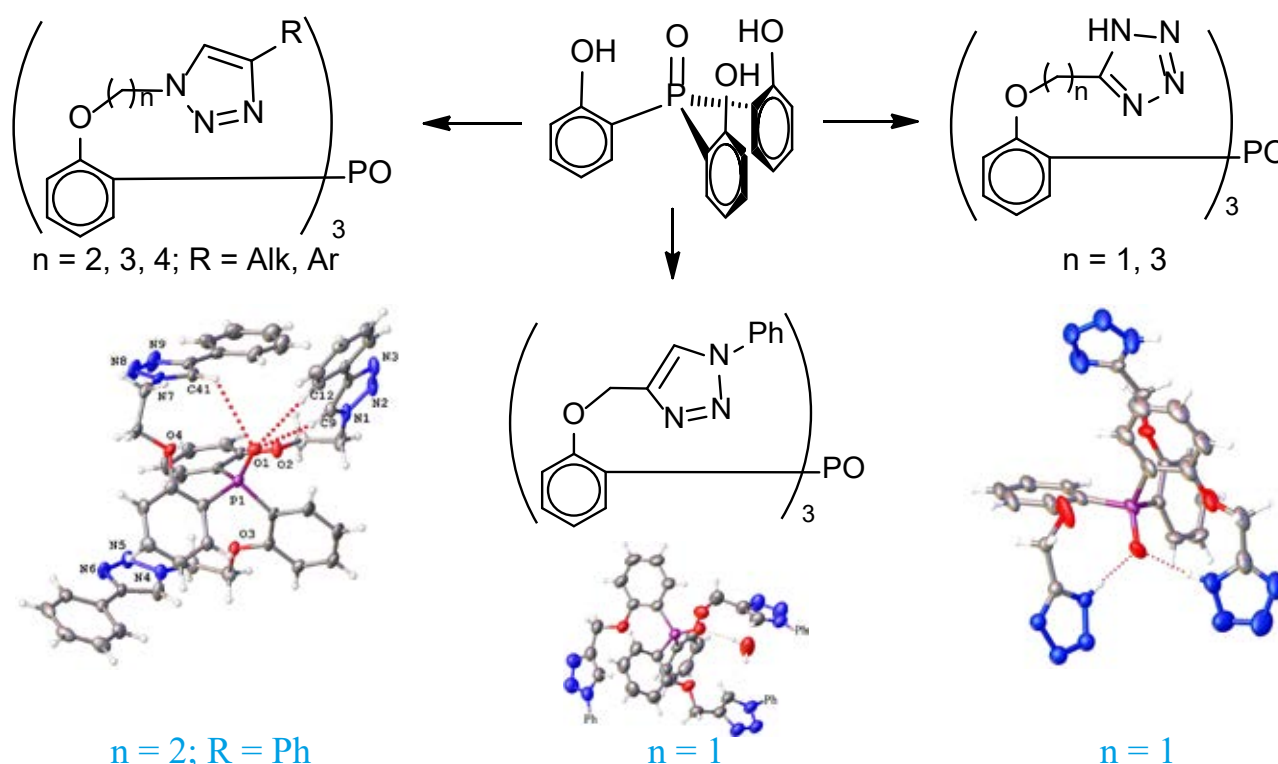
В литературе люминесцентные свойства 3-оксидов имидазола ранее не были описаны. Для всех 3-оксидов 5-ацетилимидазола **7-14** были изучены спектрально-люминесцентные свойства в зависимости от заместителя в положении 4 фенильного радикала и полярности растворителя. Было установлено, что некоторые производные являются ICT-флуорофорами, где наблюдается внутримолекулярный перенос заряда.

## ТРИ- И ТЕТРАЗОЛЬНЫЕ ТРИПОДАЛЬНЫЕ ПОЛИТОПНЫЕ ФОСФИНОКСИДЫ

**Баулина Т.В., Кудрявцев И.Ю., Быховская О.В., Матвеева А.Г., Пасечник М.П., Вологжанина А.В., Матвеев С.В., Кочмарик В.А., Брель В.К.**

*Институт элементоорганических соединений имени А. Н. Несмеянова Российской академии наук,  
ул. Вавилова 28, Москва, 119991 Россия  
e-mail: zaq@ineos.ac.ru*

Разработаны методы синтеза новых гибридных триподальных фосфиноксидов, модифицированных триазольными и тетразольными функциональными группами:



Получены комплексы новых лигандов с *d*- и *f*-элементами. Строение соединений исследовано методами мультijядерной ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{31}\text{P}$ ) ЯМР, ИК-, КР-спектроскопии и РСА. Изучены экстракционные свойства синтезированных соединений по отношению к *f*-элементам. Исследована биологическая активность некоторых тетразольных лигандов и их Pd-комплексов.

### Литература

1. Кудрявцев И.Ю. и др. *Monats. Chem.*, 2020, **151**, 1705-1713.
2. Матвеева А.Г. и др. *ЖОХ*, 2020, **90**, 1939-1952.
3. Быховская О.В. и др. *ЖОХ*, 2019, **89**, 1885-1894.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 20-13-00329). Рентгенодифракционные и спектральные исследования проведены при поддержке Минобрнауки РФ с использованием научного оборудования Центра исследования строения молекул ИХЭОС РАН.*

# ИМИДАЗОЛСОДЕРЖАЩИЕ ФОТОИНИЦИАТОРЫ ДЛЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ СУБМИКРОННЫХ СТРУКТУР МЕТОДОМ ДВУХФОТОННОЙ 3D-ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

[Беганцова Ю.Е.](#)<sup>а</sup>, Баранов Е.В.<sup>а</sup>, Чубич Д. А.<sup>б</sup>, Чесноков С. А.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>*Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева,  
603950, г. Нижний Новгород, Россия, ул. Троицкая 49,  
e-mail: begantsova@mail.ru*

<sup>б</sup>*Московский физико-технический институт  
(Национальный исследовательский университет),  
141700, Россия, Институтский пер. 9, Московская обл., г. Долгопрудный*

Метод двухфотонной полимеризации (2PP) для 3D-печати с субмикронным разрешением привлекает значительное внимание как эффективный инструмент для изготовления нанофотонных волноводов, скаффолдов для роста клеток и систем доставки лекарств. Для реализации всего потенциала технологии 2PP, требуются высокоэффективные двухфотонные фотоинициаторы

Впервые установлено, что имидазолсодержащие соединения с фенантроновым и фенантролиновым фрагментами эффективно инициируют 2PP индивидуально и в сочетании с аминами. Проведенные DFT-расчеты выявили корреляцию между нелинейными оптическими свойствами и фотоиницирующей активностью соединений при одно- и двухфотонной полимеризации. Фотокомпозиция на основе фенантролинсодержащего имидазола и триэтанолamina продемонстрировала самое широкое окно обработки и самую высокую степень конверсии, а также порог двухфотонной полимеризации в два раза ниже, чем у широко используемого коммерческого двухфотонного фоторезиста IP-L. Наиболее эффективная фотокомпозиция была использована для изготовления субмикронных структур и ячеистых полимерных структур методом прямого лазерного письма.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-73-10173.*

# SYNTHESIS OF ANABAZINE-AND IMIDAZOLE-CONTAINING $\alpha$ -AMINOPHOSPHONATES

[Begimova G.U.](#),<sup>1,2</sup> Yu V.K.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*S.D. Asfendiyarov Kazakh National Medical University, Tole bi av. 94, Almaty;*

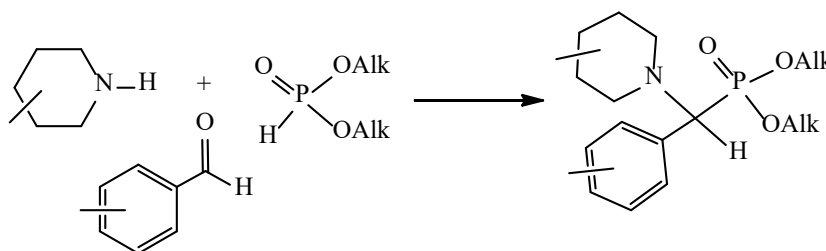
<sup>2</sup>*Kazakhstan Engineering-Technological University, av. al-Farabi 89/21, Almaty;*

<sup>3</sup>*JSC "Institute of Chemical Sciences named after A. B. Bekturov"*

*Kazakhstan; zeynep80@mail.ru*

In the present work, attention was paid to the class of organophosphorus compounds, in particular,  $\alpha$ -aminophosphonates, which are similar in structure to natural amino acids and have antibacterial, antimicrobial, antitumor, etc. properties. In addition, they are also widely used as fungicides, herbicides and insecticides. And due to the ability to form complex compounds with various metals, they are used in agriculture as fertilizers, with the help of which microelements can be introduced into the soil. Having solved the problem of introducing an organophosphorus fragment into the azaheterocycle molecule, there is a high probability of creating new anti-infectious BAS. As well as the possibility of expanding the field of practical application of aminophosphonates as ligands for organometallic catalysts [1-2].

The interaction of the amine with dialkyl phosphoric acid and aromatic aldehyde was carried out by boiling in benzene using a Dean-Stark nozzle for water released as a result of the reaction in the form of an azeotrope with a solvent for 12-20 hours:



The yield of the target product is 60-70%. The use of acetic acid or p-toluene sulfonic acid as a catalyst does not significantly accelerate the reaction process.

## References

Venkata N. R. Chava *et al* An Efficient One Pot Synthesis of Carbazole-Based  $\alpha$ -Aminophosphonates under Solvent- Free and Catalyst-Free Conditions.// *Der Chemica Sinica*. – 2012. - 3(3). – P. :548-556

Begimova G.U., Tupikina E. Yu., Yu V. K., Denisov G. S., Bodensteiner M., Shenderovich I. G. The Effect of Hydrogen Bonding to Water on the <sup>31</sup>P Chemical Shift Tensor of Phenyl- and Trialkylphosphine Oxides and  $\alpha$ -Amino Phosphonates // *Journal of Physical Chemistry. C*. – 2016. – 120(16). – P. 8717-8729. DOI:10.1021/acs.jpcc.6b01140.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВВЕДЕНИЯ АТОМОВ ХЛОРА НА СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ФТАЛОЦИАНИНОВ МЕТАЛЛОВ

**Бонегардт Д.В., Сухих А.С., Басова Т.В.**

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,  
630090, Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева 3,  
e-mail: bonegardt@niic.nsc.ru*

Фталоцианины металлов представляют значительный интерес как активные слои химических сенсоров ввиду их термической и химической стабильности, способности образовывать тонкие пленки и изменять свою проводимость в зависимости от состава газовой фазы. Тонкие пленки фталоцианинов имеют обратимый сенсорный отклик на различные газообразные аналиты при комнатной температуре с достаточно низким временем отклика. Было показано, что введение различных заместителей во фталоцианиновое кольцо оказывает существенное влияние не только на структуру и морфологию тонких пленок, но и на их сенсорные характеристики. Так, модификация макроцикла атомами фтора приводит к увеличению сенсорного отклика на газы электронодонорной природы, например, аммиак, сероводород, водород и др.

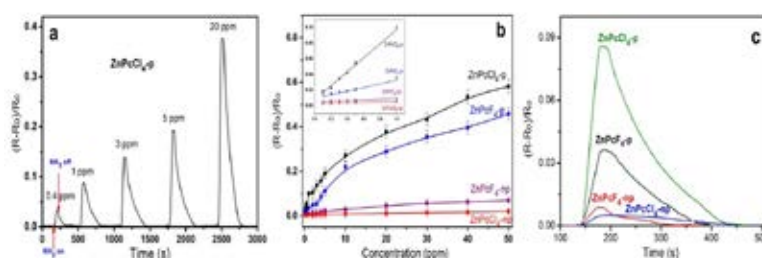


Рисунок 1. Сенсорный отклик пленок  $ZnPcCl_4$ -p на аммиак (a) и зависимость сенсорного отклика пленок  $ZnPcF_4$ -np,  $ZnPcCl_4$ -p,  $ZnPcCl_4$ -np и  $ZnPcCl_4$ -p от концентрации аммиака

В данной работе изучены структурные особенности и сенсорные характеристики тетрахлорзамещенных фталоцианинов металлов. На примере  $ZnPcX_4$  ( $X = F, Cl$ ) показаны различия свойств исследованных комплексов в зависимости от природы и положения атома галогена во фталоцианиновом кольце (Рис. 1). Структура тетрахлорзамещенных фталоцианинов металлов и их пленок исследована спектроскопическими и рентгеноструктурными методами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-73-00080.

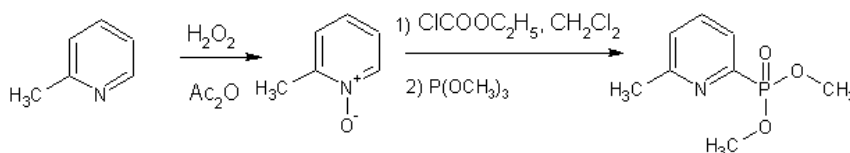
# СОЕДИНЕНИЯ БИС-ДИАЛКИЛФОСФОНАТОВ НА ОСНОВЕ ПИРИДИН И БИПИРИДИЛПРОИЗВОДНЫХ В ЭКСТРАКЦИИ F-ЭЛЕМЕНТОВ

**Бровкова М.В., Иванов А.В., Борисова Н.Е., Матвеев П.И.**

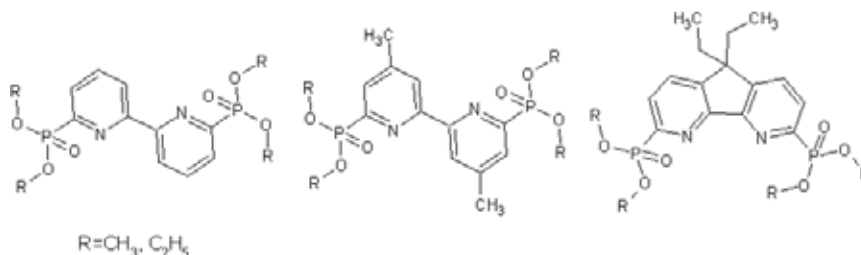
*Химический факультет МГУ, 119991, Москва, Ленинские Горы д. 1, стр. 3  
e-mail: margarita.brovkova@chemistry.msu.ru*

Лиганды, содержащие жесткие (кислород) и мягкие (азот) центры, обеспечивают хорошее связывание с f-элементами. Бипиридилные лиганды, содержащие фосфонатные группы имеют преимущество по сравнению с диамидными<sup>1</sup> из-за большей устойчивости к гидролизу.

Возможность получения ряда бис-диалкилфосфонатов бескаталитическим способом была исследована на 2-метилпиридине. Общий метод синтеза представляет собой окисление пиридинового азота до N-оксида и дальнейшее фосфорилирование с помощью триалкилфосфитов<sup>2</sup>:



Для увеличения размера полости лиганда за счет повышения дентатности был произведен переход к бипиридилным (2,2'-бипиридил и 4,4'-диметил-2,2'-бипиридил) структурам и 9,9-диэтил-9H-флуорену.



На основе синтезированных лигандов получены и охарактеризованы масс-спектрометрически комплексы с солями лантаноидов и актинидов. Лиганды протестированы в экстракционных экспериментах по разделению 4-f и 5-f элементов.

## Литература

1. D. O. Kirsanov, N. E. Borisova, M. D. Reshetova, A. V. Ivanov, L. A. Korotkov, I. I. Eliseev, M. Yu. Alyapyshev, I. G. Spiridonov, A. V. Legin, a Yu. G. Vlasov, a and V. A. Babain. *Synthesis and characterization of 2,6-bis-hydrazinopyridine, and its conversion to 2,6-bis-pyrazolylpyridines*// Russian Chemical Bulletin, International Edition, Vol. 61, No. 4, pp. 881—890, April, 2012
2. Sang-Jin Lee, Hyun-Soo Kim, Hae-Won Yang, Byung-Woo Yoo, and Cheol Min Yoon. *Synthesis of Diethyl Pyridin-2-ylphosphonates and Quinolin-2-ylphosphonates by Deoxygenative Phosphorylation of the Corresponding N-Oxides*// Bull. Korean Chem. Soc. 2014, Vol. 35, No. 7

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект 20-73-10076).*



# СИНТЕЗ И ПРОТИВООПУХОЛЕВАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ 3-АЗАКСАНТЕНОВ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПО РЕАКЦИИ ФРИДЕЛЯ — КРАФТСА ПИРИДОКСАЛЬ-5-ФОСФАТА С ФЕНОЛАМИ

**Бурилов А.Р.,** Кибардина Л.К., Трифонов А.В., Газизов А.С., Пудовик М.А.

*ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение  
ФИЦ КазНЦ РАН, 420088, Казань, ул. Ак. Арбузова, 8  
e-mail: burilov@iopc.ru*

Реакция электрофильного замещения в ароматическое ядро, приводящая к образованию новой С-С связи, является важной реакцией в органическом синтезе. Одним из известных вариантов реакций этого типа является реакция Фриделя-Крафтса - электрофильное замещение в ароматическое ядро с участием альдегидов, приводящее к образованию диарил- и триарилметанов. Последние нашли широкое применение в медицине и промышленности.

В докладе представлены данные по синтезу новых 3-азаксантенов, образующихся по реакции Фриделя — Крафтса пиридоксаль-5-фосфата с различными фенолами. Установлено, что в зависимости от природы фенола, реакция может протекать через образование устойчивого промежуточного 4-диарилметанопиридина (1), который при перекристаллизации количественно циклизуется в 3-азаксантены (2). Показано, что соединения (2) обладают высокой противоопухолевой активностью.



*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-13-00022, <https://rscf.ru/project/21-13-00022/>»*

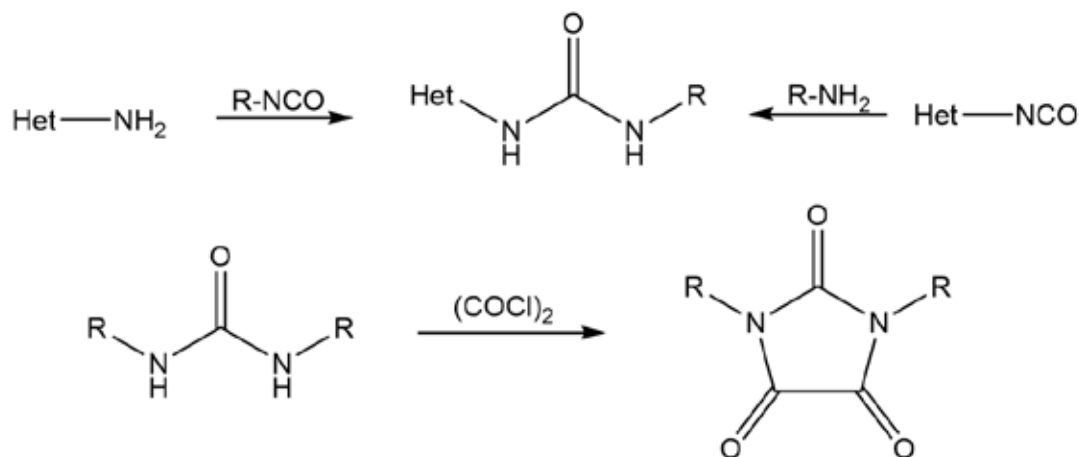
# ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРОВ РАСТВОРИМОЙ ЭПОКСИДГИДРОЛАЗЫ

**Бурмистров В.В., Дьяченко В.С., Бутов Г.М.**

*Волгоградский государственный технический университет,  
400005, Россия, г. Волгоград, пр. им. Ленина 28  
E-mail: crus\_himself@mail.ru*

В работе приводятся данные по исследованию некоторых классов гетероциклических соединений (имидазолидин-2,4-дионы, 2-тио- и 2-селеноимидазолидин-4-оны, имидазолидин-2,4,5-трионы, пиран-2-оны, пиразолы и изоксазолы) в качестве ингибиторов растворимой эпексидгидролазы человека hsEH. Исследование ингибирующей активности проводилось как в отношении эпексидгидролазного (hsEH-H), так и фосфатазного (hsEH-P) доменов hsEH.

Ингибиторы уреидного типа, содержащие фрагменты пиран-2-онов, пиразолов или изоксазолов, получали из исходных соединений (аминов или изоцианатов), содержащих данные группы. Гетероциклизация широкого спектра 1,3-дизамещенных мочевинок оксалил- или малонил- хлоридами приводила к образованию имидазолидин- или пириимидин- 2,4,5(6)-трионов.



Установлено, что ингибирующая активность ( $\text{IC}_{50}$ ) в отношении hsEH для 1,3-дизамещенных мочевинок, содержащих пиразолильный фрагмент составляет от 16.2 до 50.2 нмоль/л. В случае имидазолидин-2,4,5-трионов, ингибирующая активность составила от 0.4 нмоль/л до 8.4 мкмоль/л. Несмотря на то, что имидазолидин-2,4,5-трионы обладают более низкой активностью, чем мочевины, из которых они были получены, их растворимость в воде значительно выше, что делает их более биодоступными.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-73-10002).*

# НОВЫЕ МЕТОДЫ СИНТЕЗА И ТРАНСФОРМАЦИИ ФУНКЦИОНАЛЬНО ЗАМЕЩЕННЫХ S-ТЕТРАЗИНОВ

**Быстров Д.М., Ферштат Л.Л.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: bystrov@ioc.ac.ru*

Производные s-тетразинов являются привлекательными энергоемкими соединениями благодаря повышенной термостойкости, а также высоким энтальпиям образования и отличным детонационным характеристикам. Тем не менее, к настоящему моменту известно не так много подходов к прямому введению эксплозофорных заместителей в тетразиновый цикл<sup>1</sup>.

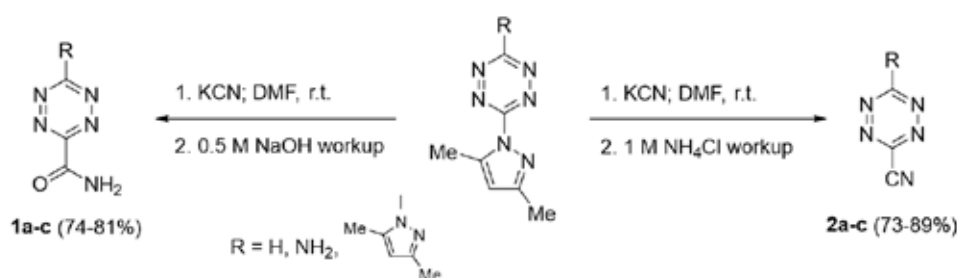


Рисунок 1. Нуклеофильное замещение 3,5-диметилпиразольной группы в s-тетразинах под действием цианид-аниона.

Нами была разработана методика замещения 3,5-диметилпиразольной группы в s-тетразинах под действием цианид-аниона. В зависимости от метода обработки могут быть получены соответствующие амиды (**1a-c**) или нитрилы (**2a-c**) (рис. 1).

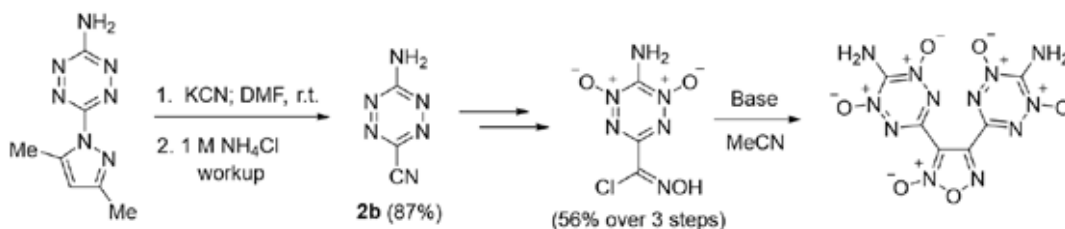


Рисунок 2. Синтез новых энергоемких производных аминотетразина.

С использованием данной методики с хорошим выходом был получен 3-амино-6-циано-1,2,4,5-тетразин (**2b**). Данное соединение было использовано в качестве прекурсора в синтезе новых энергоемких производных аминотетразина (рис. 2).

## Литература

1. D. E. Chavez, M. A. Hiskey, *J. Energ. Mater.*, **1999**, 17, 357.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и правительства Москвы (проект № 21-33-70056).*

# ПОЛЯРНОСТЬ И СТРОЕНИЕ ТРИС[2-(2-ПИРИДИЛ)ЭТИЛ]-ФОСФИНА, ТРИС[2-(4-ПИРИДИЛ)ЭТИЛ]ФОСФИНА И ИХ ХАЛЬКОГЕНИДОВ

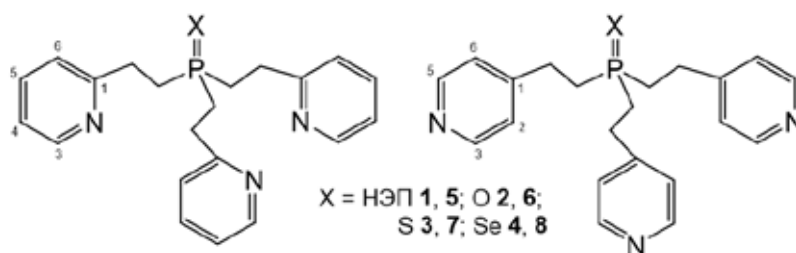
**Верещагина Я.А.,<sup>а</sup> Кузнецова А.А.,<sup>а</sup> Халиуллина Н.М.,<sup>а</sup> Чачков Д.В.,<sup>б</sup> Малышева С.Ф.,<sup>в</sup> Белогорлова Н.А.<sup>в</sup>**

<sup>а</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008, Казань,  
 ул. Кремлевская, 18  
 e-mail: yavereshchagina@gmail.com

<sup>б</sup> Казанское отделение Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук – филиал Федерального научного центра «Научно-исследовательский институт системных исследований РАН», 420111 Казань, ул. Лобачевского, 2/31

<sup>в</sup> Иркутский институт химии имени А.Е. Фаворского СО РАН,  
 664033 Иркутск, ул. Фаворского, 1

Производные фосфинов с ароматическими заместителями широко используются как лиганды для дизайна металлокомплексов различного назначения [ ]. Впервые определена полярность и установлено строение в растворе трис[2-(2-пиридил)этил]-фосфина, трис[2-(4-пиридил)этил]-фосфина и их халькогенидов **1-8** методами дипольных моментов, ИК спектроскопии и квантовой химии DFT B3PW91/6-311++G(df,p).



через одну строку – информация о грантах, программах и т.п., в рамках которых выполнена работа (размер шрифта 12 пт., выравнивание по ширине страницы)

## Литература

1. Иванов И.И., Петров П.П. *Электрохимия*, 2006, **42**, 774.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-03-00119.*

# РЕГИОСЕЛЕКТИВНОСТЬ РЕАКЦИИ ИМИДАЗОТРИАЗИНТИОНОВ С ЭТИЛФЕНИЛПРОПИОЛАТОМ

**Виноградов Д.Б., Изместьев А.Н., Газиева Г.А.**

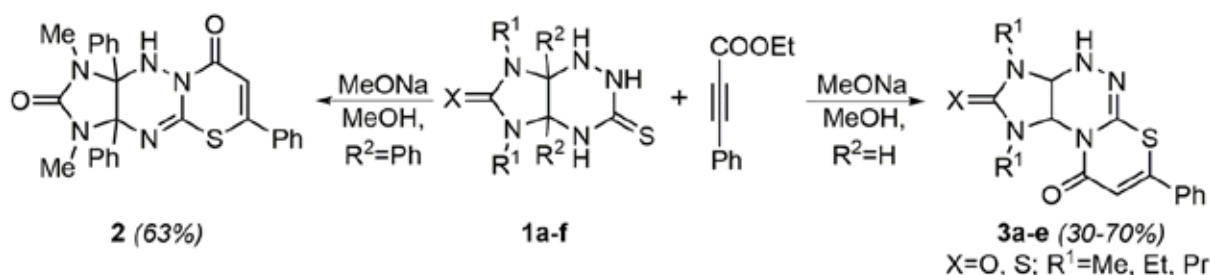
*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail; vinogradovima14@ioc.ac.ru*

Развитие селективных методов синтеза новых гетероциклических соединений является одной из важнейших задач органической химии.

Ранее в нашей лаборатории была исследована селективность реакции имидазотриазинтионов **1** с диалкилацетилендикарбоксилатами, в результате которой разработаны методы регионаправленного синтеза имидазотиазоло[3,2-*b*]триазинов, которые затем претерпевали скелетную перегруппировку с образованием изомерных имидазотиазоло[2,3-*c*]триазинов<sup>1</sup>.

В настоящей работе изучена реакция имидазотриазинтионов с аналогичным диэлектрофильным реагентом – этилфенилпропиолатом, в результате которой следовало ожидать образования триазинового цикла<sup>2</sup>.

Несмотря на структурную схожесть диалкилацетилендикарбоксилатов с этилфенилпропиолатом, реакции протекали только в условиях катализа метилатом натрия в кипящем метаноле. При этом в зависимости от природы заместителя ( $R^2$ ) в мостиковых положениях бициклической системы **1**, наблюдалась различная региоселективность циклоконденсации с образованием изомерных имидазотиазино[3,2-*b*]триазина **2** (для  $R^2=Ph$ ) или имидазотиазино[2,3-*c*]триазинов **3a-e** (для  $R^2=H$ ).



Строение полученных соединений было подтверждено данными одномерных и двумерных (HMBC) ЯМР экспериментов.

Таким образом, в ходе работы были получены представители двух новых гетероциклических систем имидазотиазинотриазина, как ангулярного, так и линейного строения.

## Литература

1. Izmet's'ev A.N., Vinogradov D.B., Kolotyorkina N.G. et al. *Beilstein J. Org. Chem.*, 2021, **17**, 1141.
2. Danilkina N.A., Vershilov S.V., Ganina M.B. et al. *Russ. J. Gen. Chem.*, 2004, **74**, 472.

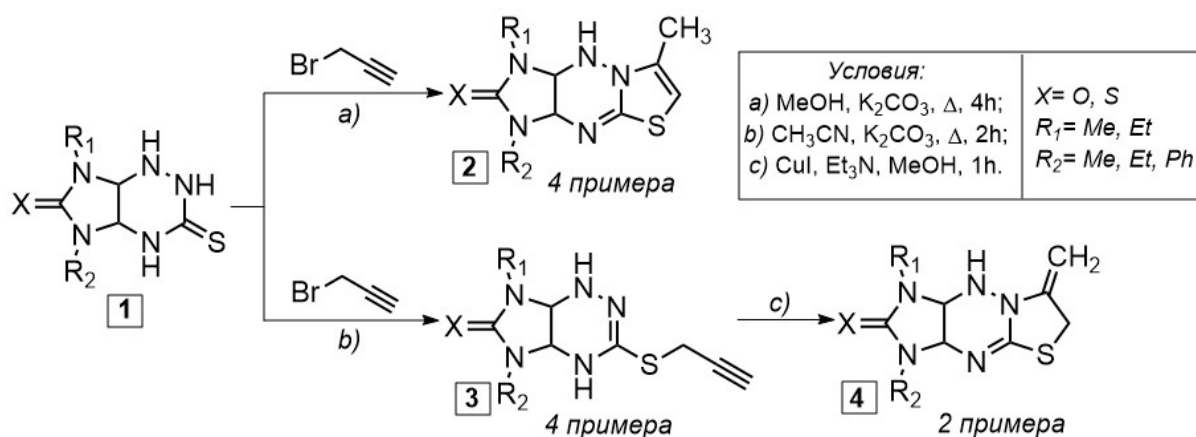
# СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ИМИДАЗОТИАЗОЛОТРИАЗИНОВ

**Виноградова Е.Е., Газиева Г.А.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: vinogradova.ekaterina@ioc.ac.ru*

На протяжении многих лет отмечалось, что различные типы биологической активности, такие как противораковая, анальгетическая, связаны с тиазоловым фрагментом и с его аннелированными производными<sup>1</sup>. Поэтому перспективным направлением исследований является создание нового ряда имидазотиазолотриазинов с потенциальной биологической активностью.

На первом этапе исследований изучено взаимодействие имидазотриазинтионов **1** с пропаргилбромидом. Разработаны подходы, позволяющие получить изомерные имидазотиазоло[3,2-*b*]триазины **2** и **4** варьируя условия реакции.



При оптимизации условий реакции неожиданно было обнаружено, что в условиях *a*) образуются только имидазотиазолотриазины **2** с эндоциклической двойной связью. Вероятно, происходит последовательность реакций алкилирования-внутримолекулярной циклизации. Однако при замене растворителя (условия *b*) образуется только продукт S-алкилирования **3**. При действии на него Et<sub>3</sub>N с добавлением CuI (условия *c*) удастся получить имидазотиазолотриазины только с экзоциклической двойной связью **4**.

Таким образом, подобраны условия реакций, позволяющие получать соединения как циклического, так и ациклического строения. В дальнейшем предполагается использование замещенных пропаргилбромидов, подбор условий для получения региоизомерных соединений, а также изучение биологической активности полученных соединений.

## Литература:

1. Mishra R., Sharma P. K., Verma P. K., et al. *J. Heterocycl. Chem.*, 2017, **54**, 2103.

# ДИЗАЙН НОВЫХ ФОТОЛАБИЛЬНЫХ ЗАЩИТНЫХ ГРУПП НА ОСНОВЕ ОСТОВА BODIPY

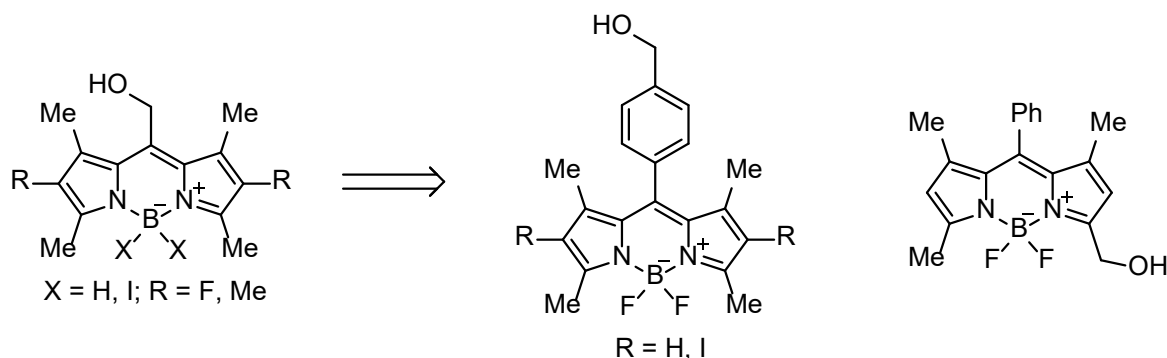
**Воробьев А.Ю.<sup>а,б</sup>, Зобнина А.О.<sup>а</sup>, Панфилов М.А.<sup>а</sup>, Москаленский А.Е.<sup>б</sup>**

<sup>а</sup>Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова  
СО РАН, 630090, Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, д.9

<sup>б</sup>Новосибирский государственный университет  
630090, Новосибирск, ул. Пирогова, д. 1  
e-mail: vor@nioch.nsc.ru

Фотолабильные защитные группы (ФЗГ) нашли широкое применение в биологических и биохимических исследованиях, так как позволяют достигать достаточно точного пространственно-временного контроля концентрации активных веществ при использовании малоинвазивного фактора – светового излучения. В последнее время большое внимание уделяется ФЗГ, работающим в области видимого, красного и ближнего ИК света, что интересно с точки зрения применения таких ФЗГ *in vivo*.

Ранее в качестве ФЗГ были предложены производные *мезо*-CH<sub>2</sub>OH-BODIPY. Однако для данного типа ФЗГ характерен низкий квантовый выход высвобождения защищаемых субстратов. В нашей работе мы исследовали возможность использования производных *мезо*-(4-гидроксибензилфенил)-BODIPY и 3-гидроксибензил-BODIPY для защиты карбоновых кислот.



Было показано, что предложенные группы превосходят по эффективности описанные ранее *мезо*-CH<sub>2</sub>OH-BODIPY.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 18-15-00049.



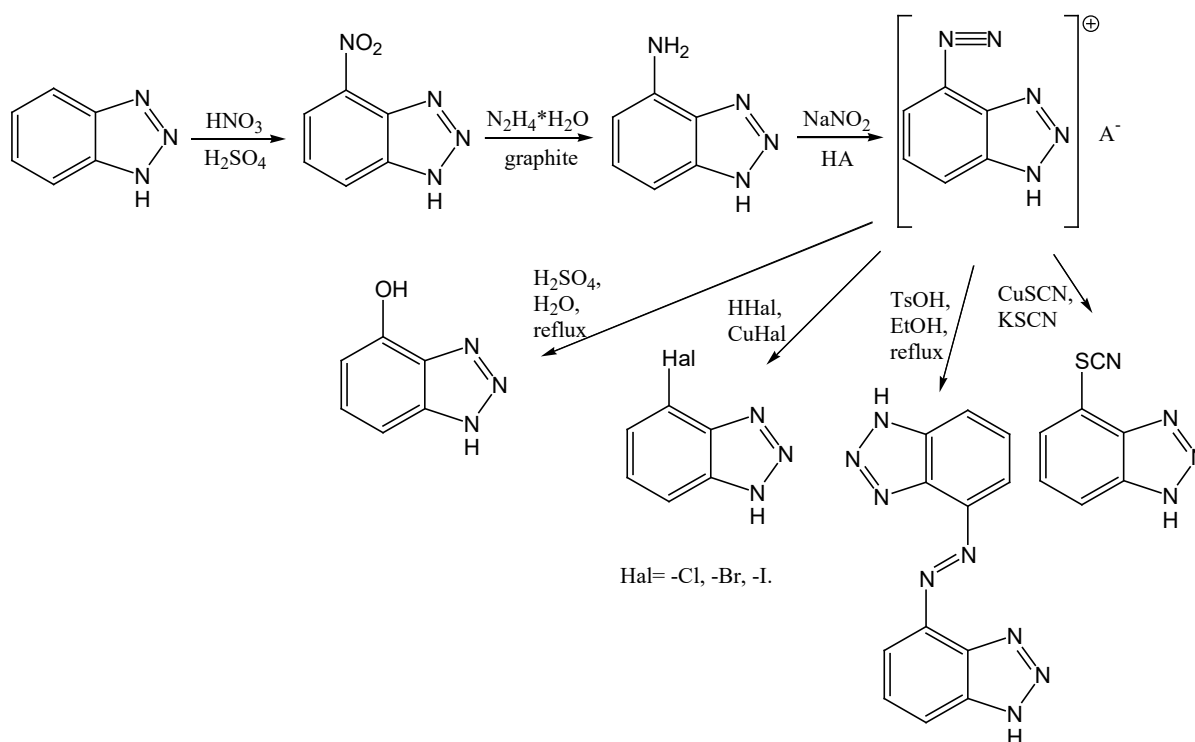
# ДОСТУПНЫЙ СИНТЕЗ 4-R-БЕНЗОТРИАЗОЛОВ

**Воробьев С.В., Кошелев В.Н.**

*РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, 119991, Москва, Ленинский проспект 65,  
e-mail: vorstepan@yandex.ru*

Бензотриазол и его производные находят широкое применение в органическом синтезе, фармацевтической промышленности, а также в качестве противокоррозионных реагентов<sup>1,2</sup>. В литературе преимущественно описаны N-замещенные производные бензотриазола, в то время как данные о C-замещенных практически отсутствуют. Их синтез осложнен тем, что бензотриазол с трудом вступает в реакции электрофильного замещения.

Нами предложен способ получения C-производных бензотриазола из промежуточного 4-аминобензотриазола, синтез которого может быть проведен нитрованием бензотриазола с последующим восстановлением<sup>3</sup>. Диазотирование 4-аминобензотриазола позволяет получить ряд 4-R-замещенных бензотриазолов с умеренными выходами (40-70%). При попытке синтеза 4-этоксibenзотриазола наблюдалось восстановление промежуточно образующейся соли диазония с образованием азобензотриазола.



Полученные соединения были охарактеризованы с помощью ИК- и масс-спектрометрии.

## Литература

1. Katritzky A.R. et al. *Chem.Rev.*, 1998, **98**, 409.
2. Kale R.R. et al. *Monatsh.Chem.*, 2010, London, **141**, 1159.
3. Graham D., McAnally G. *Heterocycl. Commun.*, 1999, **5**, 377.

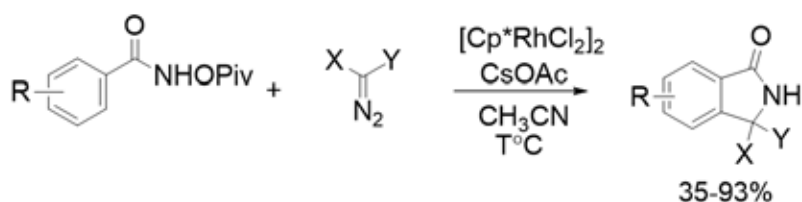
# РОДИЙ (III)-КАТАЛИЗИРУЕМАЯ СН-АКТИВАЦИЯ/АННЕЛИРОВАНИЕ АРИЛГИДРОКСАМАТОВ С ДИАЗОСОЕДИНЕНИЯМИ

Воробьева Д.В., Бубнова А.С., Осипов С.Н.

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Вавилова 28,  
e-mail: vorobyeva-daria@yandex.ru*

Низкомолекулярные функционально замещенные гетероароматические соединения являются важными объектами для поиска новых потенциальных лекарственных препаратов. Модификация таких молекул атомами фтора или фторалкильными группами способно существенным образом улучшить их фармакокинетические свойства<sup>1</sup>. Поэтому разработка новых эффективных методов селективного введения CF<sub>3</sub>-содержащих группировок в (гетеро)арены представляет значительный интерес.

Ранее нами был предложен эффективный метод карбеноидной СН-функционализации (гетеро)аренов с использованием легко доступного метил-3,3,3-трифтор-2-дiazопропионата в качестве источника CF<sub>3</sub>-карбена при катализе комплексами трехвалентного родия<sup>2-4</sup>. В настоящей работе будут представлены результаты исследования Rh(III)-катализируемой тандемной реакции С-Н активации/гетероциклизации производных арилгидроксиамовой кислоты с различными диазосоединениями акцептор-акцепторного типа.



## Литература

1. Zhu Y., Han J., Wang J., Shibata N., Sodeoka M., Soloshonok V.A., Coelho J.A.S., Toste F.D. *Chem. Rev.* 2018, **118**, 3887.
2. Iagafarova I.E., Vorobyeva D.V., Peregudov A.S., Osipov S.N. *Eur. J. Org. Chem.*, 2015, 4950.
3. Iagafarova I.E., Vorobyeva D.V., Loginov D.A., Peregudov A.S., Osipov S.N. *Eur. J. Org. Chem.*, 2017, 840.
4. Vorobyeva D.V., Vinogradov M.M., Nelyubina Yu.V., Loginov D.A., Peregudov A.S., Osipov S.N. *Org. Biomol. Chem.*, 2018, **16**, 2966.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-13-00328.*

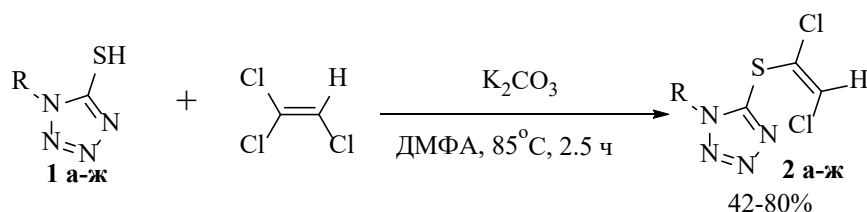
# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ДИХЛОРВИНИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАЗОЛОВ

**Ворона С.В., Зевацкий Ю.Э., Мызников Л.В.**

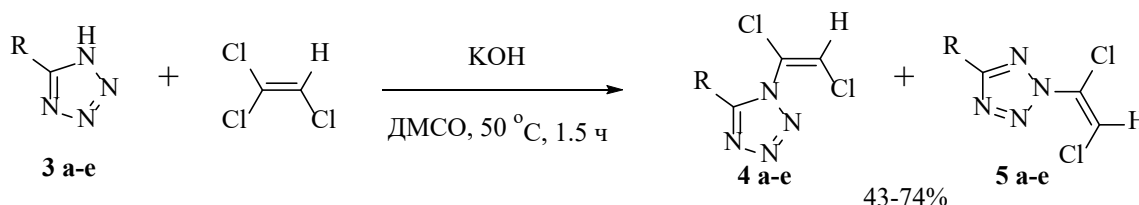
Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет), 190013, Россия,  
г. Санкт-Петербург, Московский пр., 26.  
e-mail: s.vorona@bk.ru

Винильные производные тетразолов и тиотетразолов являются мономерами для синтеза полимеров<sup>1</sup>, которые входят в состав перспективных энергоёмких материалов, газоразделительных мембран, нетканых фильтрующих материалов для медицины и других композитных материалов<sup>2</sup>. Помимо этого, винилтетразолы рассматриваются как исходные вещества для синтеза соединений, проявляющих биологическую активность<sup>3</sup>. В тоже время до настоящего времени не предложено ни одного метода получения хлорвинильных производных тетразолов.

Нашли, что трихлорэтилен является удобным субстратом для получения дихлорвинилтиотетразолов и 1- и 2-дихлорвинилтетразолов.



R = Ph (a), (2-CHF<sub>2</sub>O)C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (б), 1-нафтил (в), PhCH<sub>2</sub> (г), PhCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub> (д), с-Нex (е), CH<sub>3</sub> (ж).



R = Ph (a), 4-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (б), 4-FC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (в), 4-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (г), 4-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (д), PhCH<sub>2</sub> (е).

1-Замещенные 1H-тетразол-5-тиолы и 5-замещенные 1H-тетразолы вступают в реакцию с трихлорэтиленом с образованием соответствующих S- и N-дихлорвинильных производных. В случае 5-замещенных 1H-тетразолов реакция приводит к смеси 1- и 2-дихлорвинилтетразолов. 5-Замещенные 2-дихлорвинилтетразолы отличаются низкой термической стабильностью, однако легко вступают в реакцию полимеризации.

## Литература

1. Aleshunin P.A., Dmitrieva U.N., Ostrovskii V.A. *Zh. Org. Khim.*, 2011, **47**, 1846.
2. Kizhnyaev V.N., Vereshchagin L.I. *Usp. Khim.*, 2003, **72**, 159.
3. Diwakar S.D., Bhadwat S.S., Shingare M.S., Gill C.H. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 2008, **18**, 4678.

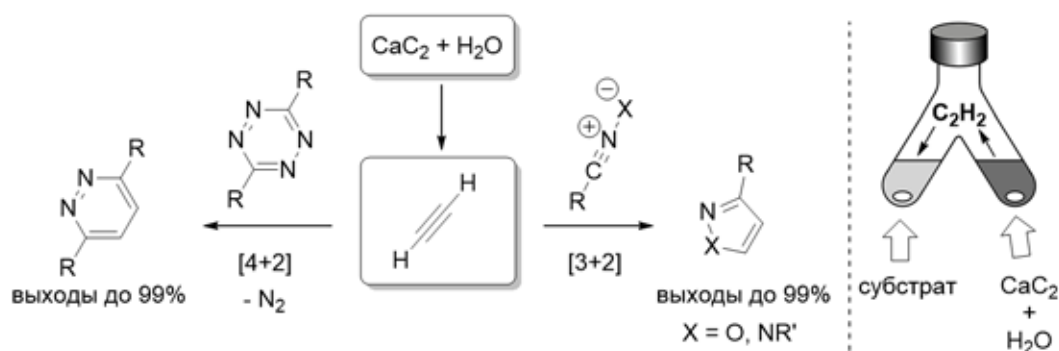
# СИНТЕЗ АЗОТИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ ИЗ АЦЕТИЛЕНА, ГЕНЕРИРУЕМОГО ИЗ КАРБИДА КАЛЬЦИЯ В ДВУХКАМЕРНОМ РЕАКТОРЕ

**Воронин В.В.,<sup>а</sup> Ледовская М.С.,<sup>а</sup> Родыгин К.С.,<sup>а</sup> Анаников В.П.<sup>а,б</sup>**

<sup>а</sup>Институт химии СПбГУ, 198504, Санкт-Петербург, Университетский проспект 26,  
e-mail: volgo-vv@mail.ru

<sup>б</sup>ИОХ РАН им. Зелинского, 119991, Москва, Ленинский проспект 47

В настоящей работе мы предлагаем простой и эффективный подход к синтезу азотистых гетероциклов, основанный на реакциях циклоприсоединения с участием генерируемого из карбида кальция и воды ацетилена. Получение ацетилена непосредственно в реакционном сосуде из карбида кальция и воды не требует сложного оборудования, позволяет значительно повысить безопасность эксперимента и избежать нежелательной утечки ацетилена.<sup>1</sup> Ключевая особенность нашего метода – использование двухкамерного реактора, что позволяет пространственно разделить смесь карбида кальция и воды и смесь, содержащую субстрат. Благодаря такому подходу становится возможным использование чувствительных к воде и основанию активных субстратов. На основе разработанных нами процедур с высокими выходами были получены пиразолы,<sup>2</sup> изоксазолы и пиридазины.



## Литература

1. Rodygin K.S., Ledovskaya M.S., Voronin V.V., Lotsman K.A., Ananikov V.P. Eur. J. Org. Chem., 2021, 2021, 43.
2. Voronin V.V., Ledovskaya M.S., Gordeev E.G., Rodygin K.S., Ananikov V.P. J. Org. Chem., 2018, 83, 3819.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-73-10032.

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ 1,3-ДИКЕТОНОВ С ИМИНАМИ АЦЕТОНА

**Галеев А.Р., Шубин К.А., Дмитриев М.В., Масливец А.Н.**

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,  
614068, Пермь, ул. Букирева 15,  
e-mail: an.galeev@yandex.ru*

Ранее нами изучена трехкомпонентная реакция электронодефицитных 1,3-дикетонов, аминов и ацетона (схема 1)<sup>1,2</sup>. Показано, что для успешного осуществления реакции необходимо наличие электроноакцепторной группы (EWG).

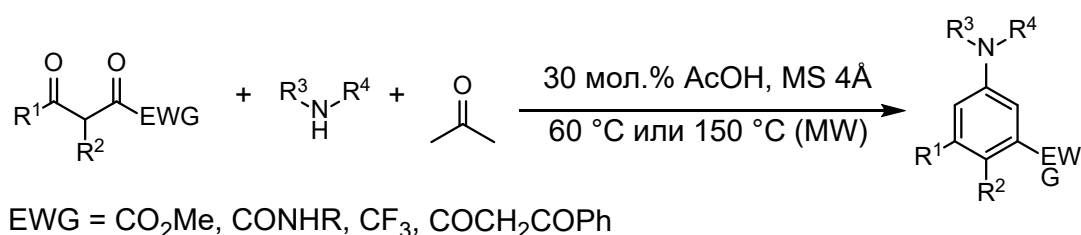


Схема 1

В данной работе исследована возможность использования гетероциклических фрагментов в качестве электроноакцепторных групп, что позволяет получать замещенные анилины с гетероциклическим фрагментом в *meta*-положении.

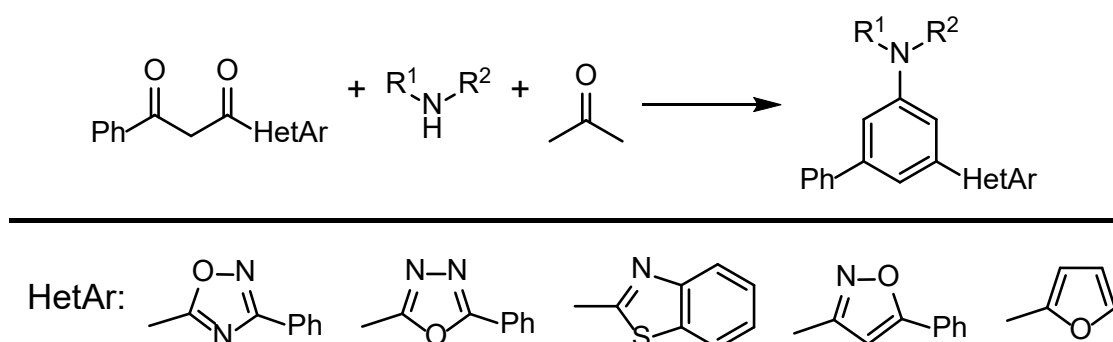


Схема 2

## Литература

- Galeev A.R., Dmitriev M.V., Mokrushin I.G., Mashevskaya I.V., Maslivets A.N., Rubin M. *Organic & biomolecular chemistry*, 2019, **17**(47), 10030.
- Galeev A.R., Mokrushin I.G., Dmitriev M.V., Maslivets A.N. *Russian Journal of Organic Chemistry*, 2020, **56**(7), 1317.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-43-596008), Минобрнауки России (проект № FSNF-2020-0008) и Правительства Пермского края.*

# ХИРАЛЬНО-ЗАВИСИМАЯ ГЕОМЕТРИЯ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ КАК КЛЮЧ К ПОНИМАНИЮ ЭНАНТИОФОБНОГО ПОВЕДЕНИЯ СЕРИИ СЕРОСОДЕРЖАЩИХ ПИРРОЛИНОНОВ

Герасимова Д.П.,<sup>a</sup> Файзуллин Р.Р.,<sup>a</sup> Захарычев Д.В.,<sup>a</sup> Сайфина А.Ф.,<sup>a</sup> Вандюкова И.И.,<sup>a</sup>  
Курбангалиева А.Р.,<sup>b</sup> Лодочникова О.А.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр  
РАН, 420088, Казань, Академика Арбузова, 8,  
e-mail: darya.p\_gerasimova@mail.ru

<sup>b</sup>Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
420008, Казань, Кремлевская, 29/1

Активное исследование кристаллизации серии N-замещённых 4-арилсульфанил-3-галоген-5-гидрокси-3-пирролин-2-онов из раствора и расплава привело нас к обнаружению их повышенной склонности к спонтанному разделению энантиомеров с возможным образованием как моноклинного, так и гексагонального конгломератов на фоне малого «удельного веса» обнаруженных рацемических кристаллов. Ключ к пониманию этой тенденции дало нам рассмотрение геометрии водородносвязанных фрагментов в хиральных кристаллах в сравнении с рацемическими, а именно: более благоприятное взаимное расположение донорной и акцепторной группировок достигается между молекулами одинаковой конфигурации в составе гомохирального ассоциата (спирали) по сравнению с молекулами противоположной конфигурации в составе гетерохиральных ассоциатов (цепочки вдоль плоскости скользящего отражения либо centrosимметричного димера). Экспериментальное исследование водородного связывания ключевой серии соединений выполнено методами монокристалльного и порошкового РСА, ИК спектроскопии, ДСК и дополнено данными квантово-химических расчётов изолированных молекул, димерных ассоциатов разного стереохимического состава и кристаллической упаковки.

## Литература

1. Gerasimova D.P., Saifina A.F., Zakharychev D.V., Fayzullin R.R., Kurbanalieva A.R., Lodochnikova O.A. *CrystEngComm*, 2021, **23**, 3907.
2. Герасимова Д.П., Сайфина А.Ф., Захарычев Д.В., Зарипова А.Р., Файзуллин Р.Р., Курбангалиева А.Р., Лодочникова О.А. *Журнал структурной химии*, 2021, **62**, 781.

Работа выполнена за счет средств гранта РНФ 17-13-01209.

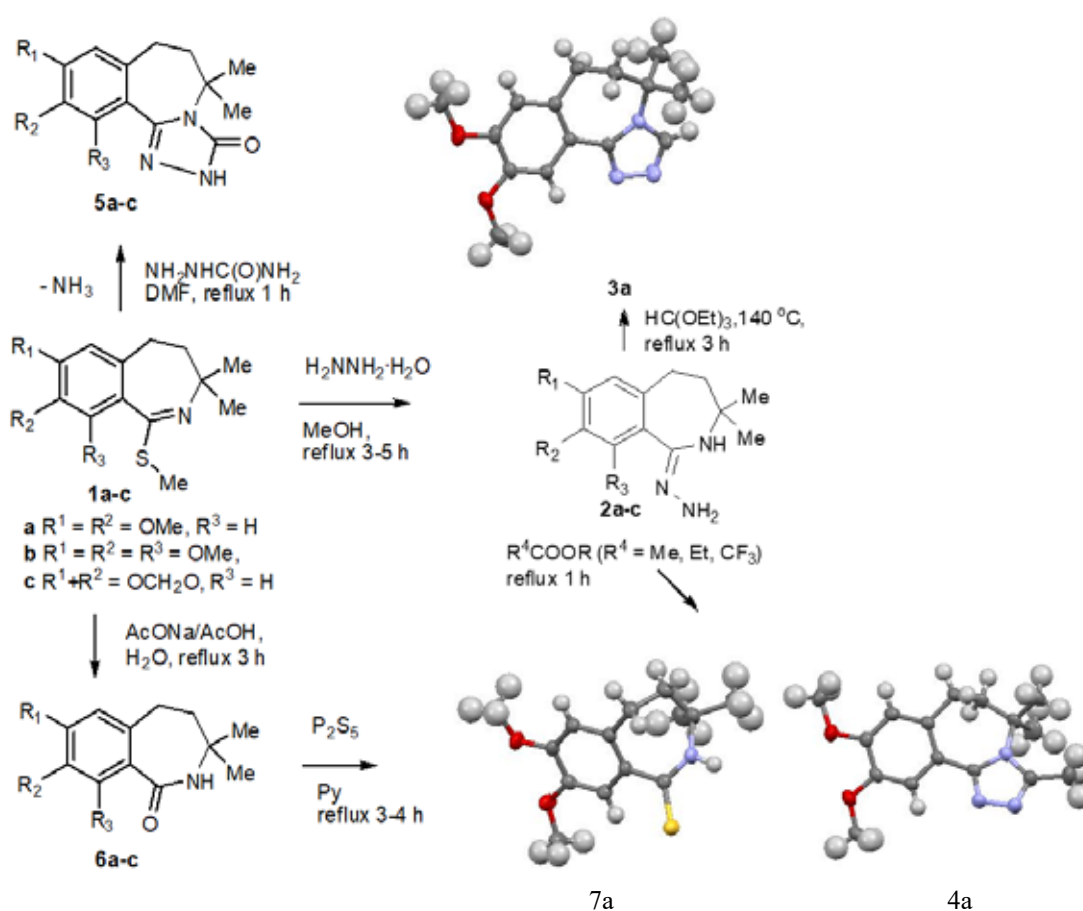
# TRANSFORMATIONS OF SUBSTITUTED 1-METHYLSULFANYL-4,5-DIHYDRO-3H-BENZO[C] AZEPINES

**Glushkov V.A.**<sup>a,b</sup>, **Zaitsev M.M.**<sup>b</sup>, **Pelykh V.S.**<sup>b</sup>, **Karasik V.I.**<sup>b</sup>, **Andreev A.I.**<sup>b</sup>, **Stepanova K.A.**<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Institute of Technical Chemistry, Perm Federal Scientific Center, Urals Branch of Russian Academy of Sciences, Academician Korolev St., 3, 614013 Perm, Russia; e-mail:glusha55@gmail.com*

<sup>b</sup>*Perm State National Research University, Bukireva St. 15, 614099 Perm, Russia*

1-Methylsulfanyl-3,3-dimethyl-4,5-dihydro-3H-benzo[c]azepines (**1a-c**), described by us earlier<sup>1</sup>, were used as starting compounds for 1,2,4-triazole annulations and other reactions:



Some compounds of the new 1,2,4-triazolobenzo[c]azepines (**3,4**) showed a pronounced sedative effect, similar to the well-known drugs of the benzo-1,4-diazepine series.

## References

1. Babentzev D.N., Dmitriev M.V., Stepanova K.A., Kharintzeva A.Yu., Simakhina A.E., Glushkov V.A. *Chem. Heterocycl. Comp.* 2021, **57**, 63.

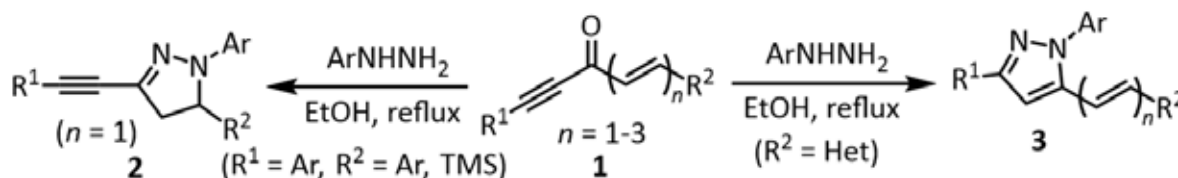


# ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ АЗАГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ОСНОВЕ КРОСС-СОПРЯЖЕННЫХ ЕНИНОНОВ

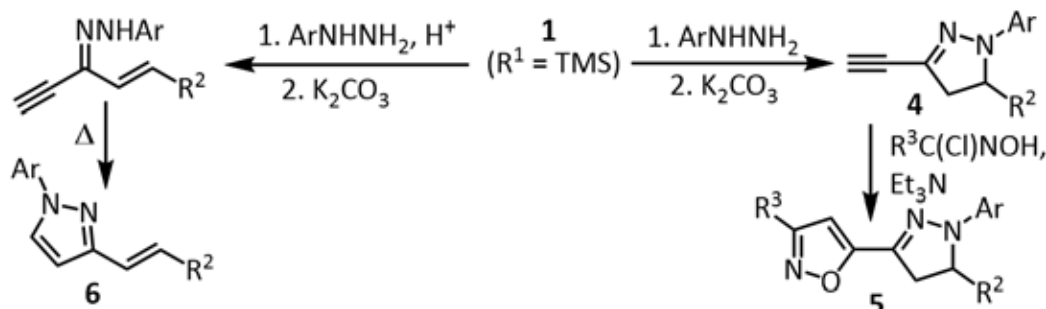
Голованов А.А., Один И.С.

Тольяттинский государственный университет, 445020, Тольятти, ул. Белорусская 14,  
e-mail: aleksandgolovanov@yandex.ru

Кросс-сопряженные ениноны **1** являются перспективными субстратами в синтезе разнообразных производных гетероциклов<sup>1</sup>. Нами подробно исследовано взаимодействие енинонов **1** с арилгидразинами. Показано, что направление циклоконденсации можно изменять, вводя различные заместители в положения 1 и 2 кросс-сопряженных енинонов ( $R^1$  и  $R^2$ ). Это позволяет синтезировать в одну стадию производные пиразолина **2** и пиразола **3** с выходами до 90%<sup>2</sup>.



На основе TMS-содержащих енинонов **1** разработаны методы получения 3-этинилзамещенных пиразолинов **4**, дигетероциклов **5** и пиразолов **6**.



Показано, что соединения **2–6** обладают флуоресцентными свойствами и могут использоваться при неразрушающем контроле металлических конструкций (люминесцентная дефектоскопия).

## Литература

Голованов А.А., Один И.С., Злотский С.С. *Успехи химии*, 2019, **88**, 280.

Golovanov A.A., Odin I.S., Gusev D.M., Vologzhanina A.V., Sosnin I.M., Grabovskiy S. A. *J. Org. Chem.*, **2021**, *86*, 7229.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 20-33-80004/20.

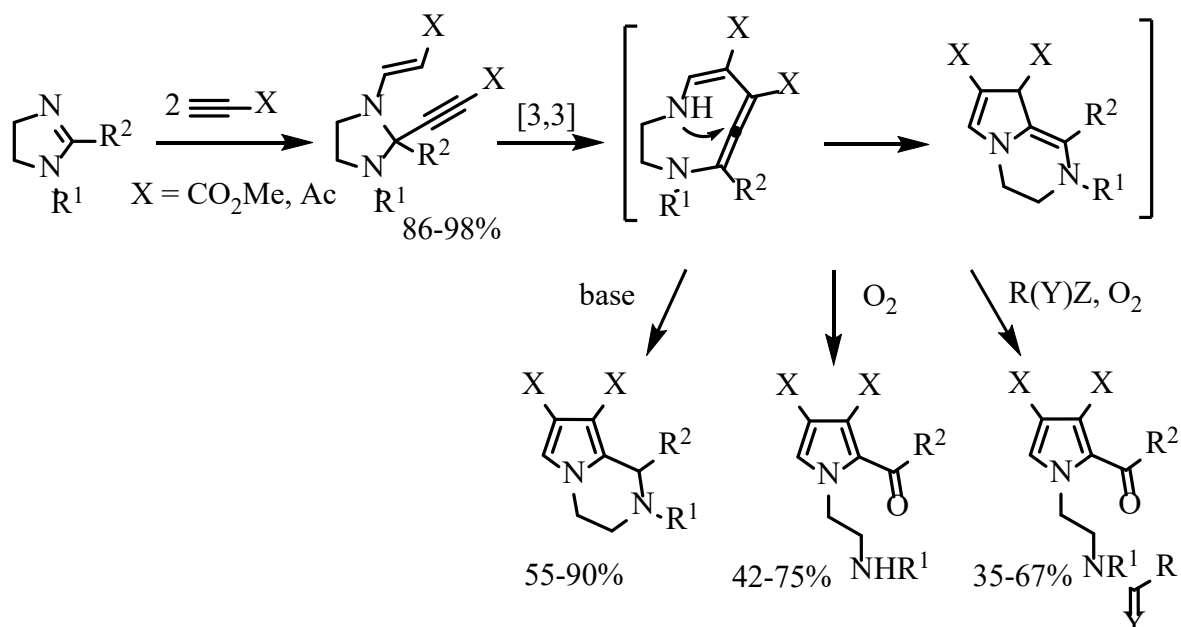
## ДОМИНО-РЕАКЦИИ 2-ИМИДАЗОЛИНОВ И ЭЛЕКТРОНОДЕФИЦИТНЫХ АЛКИНОВ

Голубенкова А.С., Голанцов Н.Е., Воскресенский Л.Г.

Российский университет дружбы народов, 117198, Москва,  
 Миклухо-Маклая 6,  
 e-mail: [aleksandra.golubenkova@mail.ru](mailto:aleksandra.golubenkova@mail.ru)

В последнее время в органическом синтезе все более актуальным становится вопрос «Как получить?», и сформулированные принципы «зеленой химии» можно считать ответом на этот вопрос. Domino-реакции соответствуют принципам «зеленой химии», что делает целенаправленный поиск новых domino-подходов одним из наиболее интересных направлений исследований.

В настоящей работе раскрываются наши последние результаты, касающиеся взаимодействия 1,2-дизамещенных 2-имидазолинов и терминальных электронодефицитных алкинов с образованием тетразамещенных имидазолидинов, а также их последующих трансформаций.



Полученные имидазолидины содержат в своей структуре концентрированный набор реакционных центров, что делает их исключительно интересными как для изучения механизмов протекающих реакций, так и для синтеза, направленного на расширение молекулярного разнообразия.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-03-00502.

# РЕАКЦИЯ БУХВАЛЬДА-ХАРТВИГА В СИНТЕЗЕ 5-АРИЛАМИНОПРОИЗВОДНЫХ 1,2,3-ТРИАЗОЛОВ

[Грибанов П.С.](#),<sup>а</sup> Филиппова А.Н.,<sup>а</sup> Топчий М.А.,<sup>б</sup> Асаченко А.Ф.,<sup>б</sup> Осипов С.Н.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук,  
119991, Москва, ул. Вавилова, 28,  
e-mail: gribanovps@mail.ru

<sup>б</sup>Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект, 29

В течение последних двух десятилетий 5-амино-1,2,3-триазолы и их производные активно исследуются в медицинской химии при разработке новых потенциальных лекарственных препаратов<sup>1</sup>. Наличие в пятом положении 1,2,3-триазолов активной аминогруппы делает основные подходы к синтезу функционализированных 1,2,3-триазолов (например, такие как CuAAC реакция азидов с ацетиленами<sup>2</sup>) непригодными для получения данного типа соединений. Недавно нами были разработаны эффективные методы получения 5-амино-<sup>3</sup> и 5-гало-1,2,3-триазолов<sup>4</sup>, основанные, соответственно, на азид-нитрильном циклоприсоединении, а также CuAAC реакции ацетиленидов меди с ариламидами с последующим галогенированием триазолидов меди. С целью их дальнейшей функционализации в настоящей работе нами предложен удобный метод синтеза полностью замещенных 5-ариламинопроизводных 1,2,3-триазолов с использованием реакции кросс-сочетания по Бухвальду-Хартвигу 5-гало- или 5-амино-1,2,3-триазолов с различными арил- и гетероарилгалогенидами. Данный подход является первым систематическим исследованием 5-амино(гало)-1,2,3-триазолов в Pd-катализируемой реакции аминирования.



## Литература

1. Bonandi E., Christodoulou M.S., Fumagalli G., Perdicchia D., Rastelli G., Passarella D., *Drug Discov. Today*, 2017, **22**, 1572.
2. Rostovtsev V.V., Green L.G., Fokin V.V., Sharpless K.B., *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2002, **41**, 2596.
3. Griбанov P.S., Atoian E.M., Philippova A.N., Topchiy M.A., Asachenko A.F., Osipov S.N., *Eur. J. Org. Chem.*, 2021, **2021**, 1378.
4. Griбанov P.S., Topchiy M.A., Karsakova I.V., Chesnokov G.A., Smirnov A.Yu., Minaeva L.I., Asachenko A.F., Nechaev M.S., *Eur. J. Org. Chem.*, 2017, **2017**, 5225.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 20-73-00291).

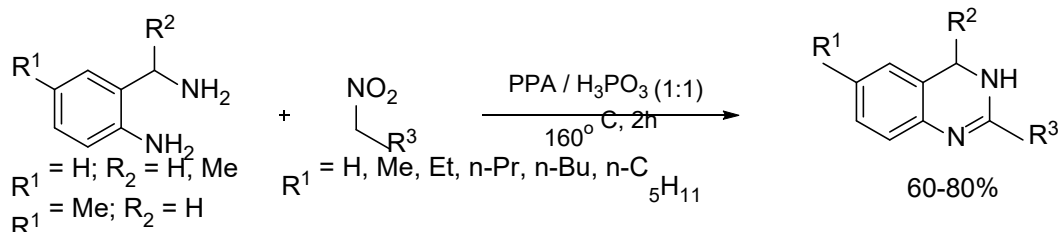
# СИНТЕЗ 3,4-ДИГИДРОХИНАЗОЛИНОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НИТРОАЛКАНОВ, ЭЛЕКТРОФИЛЬНО АКТИВИРОВАННЫХ СМЕСЬЮ ПОЛИФОСФОРНОЙ И ФОСФОРИСТОЙ КИСЛОТ

**Гришин И.Ю.,** Малюга В.В., Аксенов А.В. Савинская Е.М.,  
 Аксенов Д.А., Аксенов Н.А.

*«ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»,  
 355017, Ставрополь, улица Пушкина, 1,  
 e-mail: igrishin@ncfu.ru*

В рамках настоящего исследования осуществлен синтез 3,4-дигидрохиназолинов из производных 2-аминобензиламинов и 1-нитроалканов, активированных смесью ПФК (87%) и фосфористой кислот.

Показано, что при наличии в *o*-положении бензиламина второй нуклеофильной NH<sub>2</sub>-группы, может быть осуществлено построение хиनाзолиновой системы путем внутримолекулярной циклоконденсации с хорошим выходом.



Исходный *o*-бензиламинанилин ( $\text{R}^1=\text{H}$ ,  $\text{R}^2=\text{H}$ ) и его метильное производное ( $\text{R}^1=\text{H}$ ,  $\text{R}^2=\text{Me}$ ) были получены превращением *o*-нитрокарбонильных соединений в соответствующие оксимы с последующим их восстановлением либо  $\text{NaBH}_4$  в присутствии  $\text{TiCl}_4$  в глицерине, либо цинковой пылью в соляной кислоте. Исходный 2-(аминометил)-4-метиланилин ( $\text{R}^1=\text{Me}$ ,  $\text{R}^2=\text{H}$ ) получен из *n*-толуидина путем его иодирования, последующего превращения полученного 2-йодо-4-метиланилина в 2-амино-5-метилбензонитрил, который далее был восстановлен  $\text{LiAlH}_4$  в тетрагидрофуране.

Строение новых 3,4-дигидрохиназолинов подтверждено данными <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C ЯМР спектроскопии и масс-спектропии с высоким разрешением.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ гранты 20-33-90027 аспиранты, а также Министерства образования и науки Российской Федерации (тема 0795-2020- 0031).*

# НАПРАВЛЕННАЯ МОДИФИКАЦИЯ 2-ТИОГИДАНТОИНОВ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ НОВЫХ ЦИТОТОКСИЧНЫХ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ МЕДИ

Гук Д.А., Моисеева А.А., Белоглазкина Е.К.

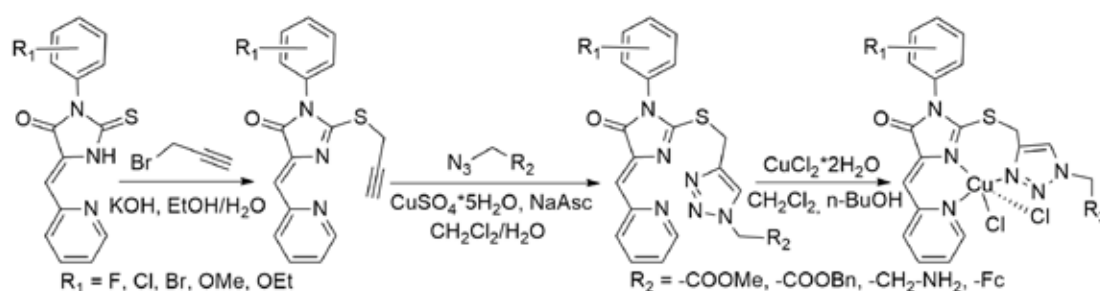
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
химический факультет, Москва, Россия  
E-mail: dmh200949@gmail.com

Основу химиотерапии на сегодняшний день составляют препараты платины. Однако риск развития тяжелых побочных эффектов делает актуальным поиск цитотоксических координационных соединений на основе биогенных металлов, и наиболее перспективного среди них – меди<sup>1</sup>.

Известно, что ключевыми факторами, определяющими механизм цитотоксического действия координационных соединений меди, являются геометрия координационной сферы. Благодаря этому интерес представляет направленная модификация свойств уже известных и проявивших высокую противоопухолевую активность соединений с целью изменить основной механизм действия за счет изменения геометрии комплекса<sup>2</sup>.

Ранее были получены тетраэдрические координационные соединения меди на основе 2-тиоимидазол-4-онов, обладающие  $CC_{50} = 1-3$  мкМ на клеточных линиях злокачественных новообразований MCF-7 и A549<sup>3</sup>.

В рамках данной работы предложен путь модификации лигандов при помощи клик-реакции, позволяющий получить новый класс гетероциклических лигандов, способных образовывать цитотоксические координационные соединения меди с квадратно-пирамидальной геометрией координационной сферы металла:



Структура полученных лигандов и координационных соединений подтверждена комплексом современных физико-химических методов, включающих <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C ЯМР, HRMS и рентгеноструктурный анализ.

## Литература

1. Theophanides T., Crit. Rev. Oncol. Hematol. 2002, 42 (1) 57.
2. Lajous H., Lelièvre B., et al. Trends Pharmacol. Sci. 2019, 40 (5), 342.
3. Krasnovskaya O. O., Guk D. A. et al. J. Med. Chem., 2020, 63 (21), 13031.

Выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 19-33-90103

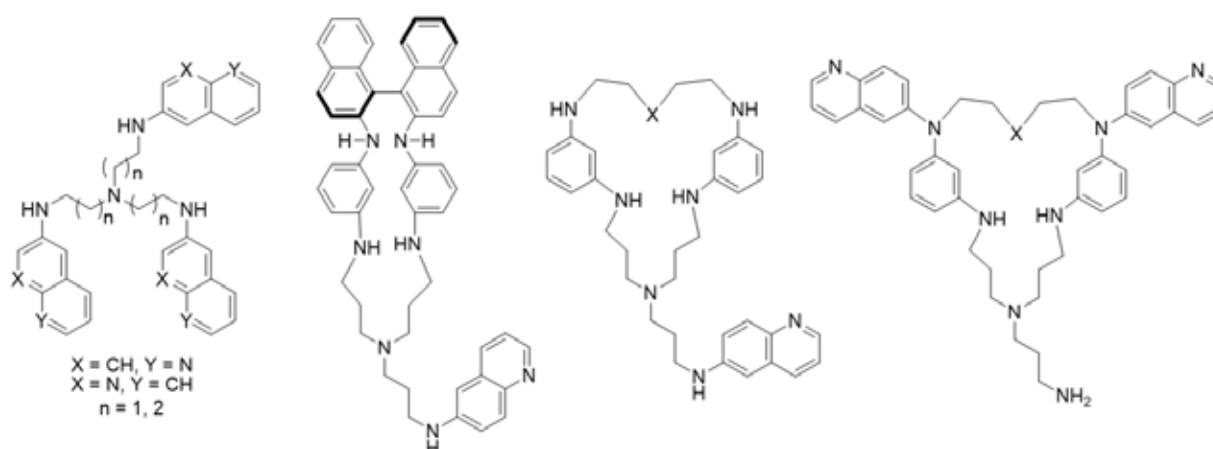
## ХИНОЛИН-ЗАМЕЩЕННЫЕ ТРИС(АМИНОАЛКИЛ) АМИНЫ И МАКРОЦИКЛЫ НА ИХ ОСНОВЕ

Гусев Д.И.,<sup>a</sup> Кулюхина Д.С.,<sup>b</sup> Черниченко Н.М.,<sup>b</sup> Аверин А.Д.,<sup>b</sup> Белецкая И.П.<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Российский Химико-Технологический Университет им. Д.И. Менделеева,  
ВХК-РАН, 125047, Москва, Миусская площадь, д. 9

<sup>b</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,  
119991, Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр.3,  
e-mail: danya.gusev@gmail.com.

Трис(2-аминоэтил)амин (tren) и трис(3-аминопропил)амин (homotren) благодаря своим координационным свойствам представляют собой важные структурные субъединицы для создания на их основе флуоресцентных хемосенсоров на катионы металлов. В развитие этого направления нами осуществлено палладий-катализируемое гетероариллирование данных разветвленных тетрааминов 6-бром- и 3-бромхинолинами, при этом получены продукты три- и тетраариллирования за счет активного протекания процесса *N,N*-диариллирования первичных аминогрупп. Также с использованием реакции Бухвальда-Хартвига осуществлен синтез макроциклических соединений, включающих в свой состав структурные фрагменты трис(3-аминопропил)амин, оксадиаминов и 6-аминохинолина. Показана возможность получения хирального макроцикла на основе (*S*)-2,2'-диамино-1,1'-бинафталина, включающего в свой состав *N*-хинолинилзамещенный homotren. Изучены спектры поглощения и флуоресценции полученных соединений в присутствии катионов 21 металла, показано, что ряд соединений представляют собой флуоресцентные молекулярные пробы на катионы Cu(II) за счет селективного тушения или разгорания флуоресценции, а один макроцикл может рассматриваться в качестве мультикатионной молекулярной пробы за счет уникального характера изменения эмиссии в присутствии Cu(II), Al(III), Li(I), Ca(II) и Y(III).



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-03-00796.

# СИНТЕЗ НОВЫХ АЗИДОПИРАЗОЛОВ И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ В РЕАКЦИИ АЗИД-АЛКИНОВОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

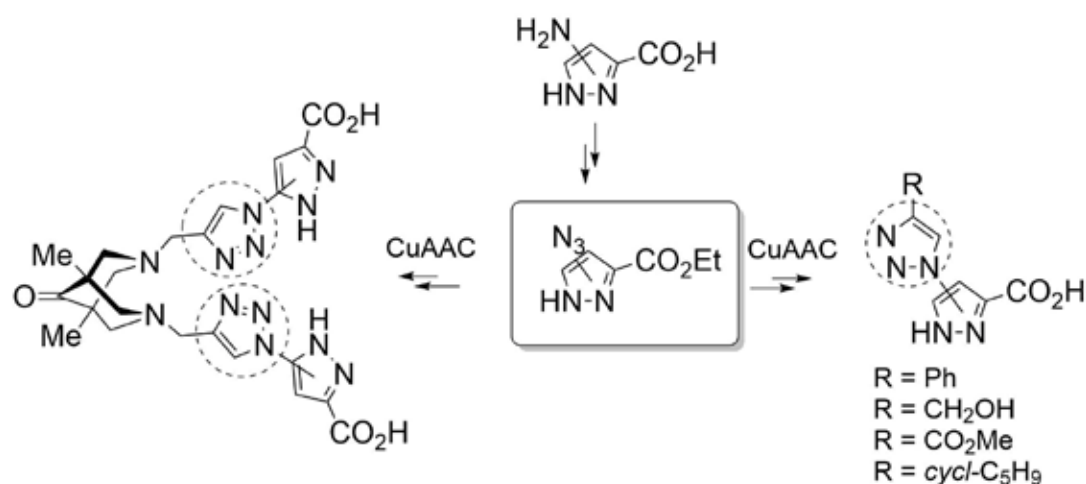
[Далингер А.И.](#)<sup>а</sup>, Вацадзе С.З.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3,  
e-mail: dal1995@mail.ru

<sup>б</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47

В настоящей работе<sup>1</sup> были получены новые лиганды на основе 1*H*-пиразол-3(5)-карбоновых кислот, содержащие в 3(5) и 4 положениях триазольный фрагмент, а также изучены подходы к синтезу конъюгатов пиразолкарбоновых кислот с бис-пидинами, которые могут найти применение в качестве рецепторных компонентов супрамолекулярных ансамблей, органо-катализаторов, а также лигандов в металлокомплексном катализе.

В качестве компонентов реакции медь-катализируемого азид-алкинового [3+2]-циклоприсоединения (CuAAC) использовались впервые полученные нами 5-азидо- и 4-азидо-1*H*-пиразол-3-карбоновые кислоты.



## Литература

1. Dalinger, A. I.; Vatsadze, S. Z.; et al. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2020**, 56 (2), 180–191.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 19-73-20090.



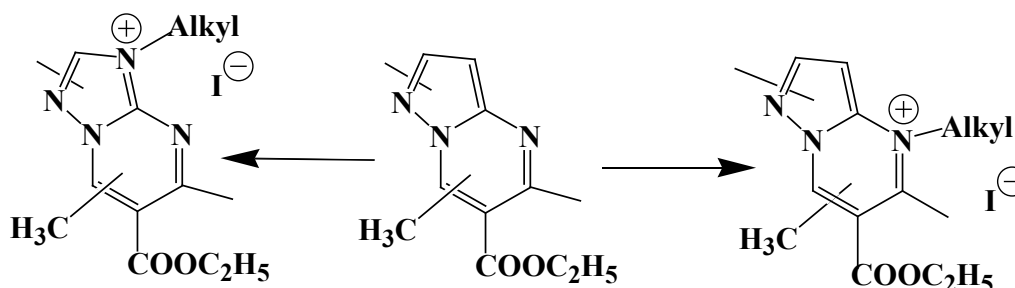
## РЕГИОСЕЛЕКТИВНОСТЬ АЛКИЛИРОВАНИЯ АЗОЛО[1,5-А]ПИРИМИДИНОВ

Данагулян Г.Г.,<sup>а,б</sup> Гарибян В.К.<sup>а</sup>, Аракелян М.Р.<sup>б</sup>

<sup>а</sup>Российско-Армянский (Славянский) университет, 0051, Ереван, ул. Овсена Эмина, 123, Армения  
e-mail: gdanag@email.com

<sup>б</sup>НТЦ Органической и фармацевтической химии НАН РА, 0014, Ереван, пр. Азатутян, 26

Изучено алкилирование конденсированных пиримидиновых систем под действием алкилгалогенидов. Показано, что пиразоло[1,5-а]пиримидины, как правило, легко алкилируются по атому азота N-4 пиримидинового кольца, тогда как введение еще одного атома азота в пятичленное кольцо меняет направление алкилирования, приводя к атаке по одному из атомов азота аннелированного триазольного кольца.



Замечено также, что на ход алкилирования влияет и положение заместителей в пиримидиновом кольце. Так, если алкилирование 2,7-диметил-6-этоксикарбонилпиразоло[1,5-а]пиримидина, как и ряда других 6-замещенных аналогов идет легко, то реакция изомерного 2,7-диметил-5-этоксикарбонилпиразоло[1,5-а]пиримидина с метил йодидом практически не идет, по-видимому, из-за обеднения электронной плотности на соседнем, со сложноэфирной группой, атоме азота.

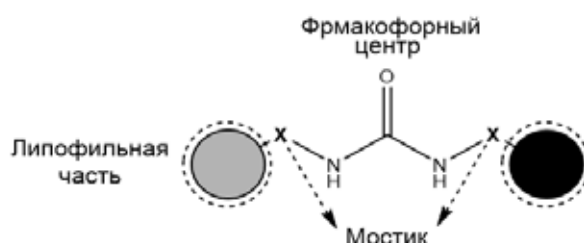
Работа выполнена при финансовой поддержке ГКН РА и РФФИ (проект 20RF-138/20-53-05010 Art\_a), а также в рамках субсидии МОН РФ научной деятельности РАУ.

# АДАМАНТИЛСОДЕРЖАЩИЕ N1,N3-ДИЗАМЕЩЕННЫЕ ИМИДАЗОЛИДИН-2,4,5-ТРИОНЫ И ПИРИМИДИН-2,4,6-ТРИОНЫ – ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ИНГИБИТОРЫ РАСТВОРИМОЙ ЭПОКСИДГИДРОЛАЗЫ (sEH)

Дьяченко В.С., Бурмистров В.В., Бутов Г.М.

Волгоградский государственный технический университет,  
400005, Россия, г. Волгоград, пр. им. Ленина 28  
E-mail: v.s.dyachenko@mail.ru

Для улучшения фармакокинетических параметров и повышения активности ингибиторов в отношении sEH, осуществлен синтез конформационно ограниченных биоизостерических аналогов производных мочевины с измененным гидрофильно-липофильным балансом.

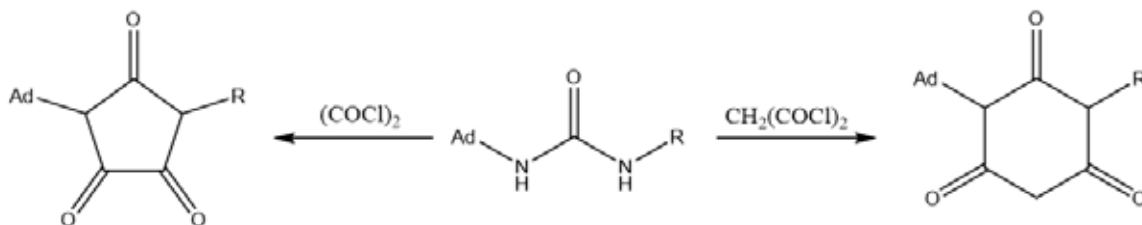


Имидазолидин-2,4,5-трионы и примидин-2,4,6-трионы относятся к окисленной форме циклической мочевины, содержащей этиленовый мостик. Простейшими представителями таких мочевины являются парабановая и барбитуровая кислоты. Структуры данных кислот предполагает только два типа замещений по атомам азота N<sup>1</sup> и N<sup>3</sup>.

Нами для получения адамантилсодержащих имидазолидин-2,4,5-трионов и примидин-2,4,6-трионов, была предложена реакция взаимодействия соответствующих адамантилсодержащих 1,3-дизамещенных мочевины с оксалил хлоридом и малонил хлоридом соответственно. Полученные соединения с отличным от уреидного фармакофорным центром были испытаны в качестве ингибиторов растворимой эпексидгидролазы человека sEH.

Исходные мочевины были получены взаимодействием адамантилсодержащих аминов с изоцианатами.

Синтез адамантилсодержащих имидазолидин-2,4,5-трионов и примидин-2,4,6-трионов осуществляли взаимодействием соответствующих адамантилсодержащих 1,3-дизамещенных мочевины с оксалил хлоридом и малонил хлоридом.



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-73-10002).

# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА СОПРЯЖЁННЫХ УЗКОЗОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ – НОВЫХ ЭЛЕКТРОНОАКЦЕПТОРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ ФОТОВОЛЬТАИКИ

[Дядищев И.В.](#),<sup>a</sup> Лупоносков Ю.Н.,<sup>a</sup> Перегудова С.М.,<sup>a,b</sup> Сурин Н.М.,<sup>a</sup> Пономаренко С.А.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук, 117393, Москва, Профсоюзная улица, 70,  
e-mail: [dyadischev\\_iv@ispm.ru](mailto:dyadischev_iv@ispm.ru)

<sup>b</sup>Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, 119334, Москва, ул. Вавилова, 28

Органические солнечные элементы (ОСЭ) привлекли к себе большое внимание из-за потенциала производства легких и недорогих гибких солнечных элементов<sup>1</sup>. В последнее время, благодаря достижениям в разработке фотоэлектрических материалов и оптимизации устройств, производительность ОСЭ быстро возросла до 17%<sup>2</sup>. Такой прогресс во многом обусловлен использованием нового поколения акцепторных материалов - нефуллереновых акцепторов (НФА).

В данной работе были синтезированы новые НФА на основе полициклических ароматических соединений. Их синтез проводят в несколько стадий. Сначала используя реакции внутримолекулярного аннелирования нитроариленов по Кадогану, получают полициклические соединения, которые выступают в качестве каркаса для получения НФА. Затем проводят реакцию N-алкилирования каркаса с использованием различных бромалканов, что позволяет настраивать растворимость и фазовое поведение заданного материала. Функционализирование карбонильной группой данных соединений позволяет путём реакции конденсации Кневенагеля вводить в целевую молекулу сильные акцепторные блоки, как индандионовый и его производные, что приводит к существенному снижению уровня энергии НСМО целевых соединений и вместе с тем к уменьшению ширины запрещённой зоны и смещению спектров поглощения в ближний-ИК диапазон спектра. Высокая чистота и заданная структура всех полученных соединений была доказана комплексом современных физико-химических методов исследования. Исследованы их оптические, электрохимические и оптоэлектронные свойства.

## Литература

1. Inganäs O. (2018). Organic photovoltaics over three decades. *Advanced Materials*, 2018, **30**, 1800388.
2. Meng L., Zhang Y., Wan X., Li C., Zhang X., Wang Y., Ke X., Xiao Z., Ding L., Xia R., et al. Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency. *Science*, 2018, **361**, 1094–1098.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-43-00051.

# ПРИМЕНЕНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАЗОЛА И ПИРИДИНА ДЛЯ СИНТЕЗА ЦИТОТОКСИЧНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ(II)

[Еремина Ю.А.](#),<sup>a</sup> Лидер Е.В.,<sup>a</sup> Ключова Л.С.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,  
630090, Новосибирск, пр-т Акад. Лаврентьева, 3  
e-mail: julia1995@ngs.ru*

<sup>b</sup> *Научно-исследовательский институт молекулярной биологии и биофизики –  
структурное подразделение ФИЦ ФТМ,  
630117, Новосибирск, ул. Тимакова, 2/12*

Азотсодержащие гетероциклы широко используются в качестве строительных блоков при синтезе потенциальных лекарственных средств, поскольку атомы азота способны легко образовывать водородные связи с различными биологическими мишенями. В частности, большой интерес вызывает возможное использование тетразолов и их комплексов в медицине. На сегодняшний день известно более 20 различных видов биологической активности соединений, в состав которых входит тетразольный цикл. Однако до недавнего времени тетразол и комплексы на его основе редко изучались в качестве противоопухолевых агентов. Одной из возможных причин является склонность тетразолов к образованию практически нерастворимых металлорганических координационных полимеров, что ограничивает их использование в медицине.

Нашей научной группе удалось частично решить проблему растворимости координационных соединений на основе тетразола за счет синтеза разнолигандных комплексов с производными тетразола и пиридина. В рамках данной работы синтезирован и охарактеризован ряд цитотоксичных разнолигандных комплексов меди(II) с производными тетразола (5-фенил-1H-тетразол (HL), 5-метил-1H-тетразол, 5-бензил-1H-тетразол) и пиридина (2,2'-бипиридин, 1,10-фенантролин, 4,4'-диметил-2,2'-бипиридин, 4,7-диметил-1,10-фенантролин (dmphen), 1,10-фенантролин-5,6-дион (phendione)). Полученные соединения охарактеризованы с помощью элементного и рентгенофазового анализа, ИК- и ЭПР-спектроскопии, термogrавиметрии. Молекулярные и кристаллические структуры некоторых соединений установлены с помощью рентгеноструктурного анализа. Исследование цитотоксической активности проводилось на клеточных линиях Hep2 (карцинома гортани), MCF-7 (аденокарцинома молочной железы) и HepG2 (гепатокарцинома) с помощью прибора IN Cell Analyzer 2200. Показано, что  $[Cu_2(dmphen)_2L_4]$  и  $[Cu(phendione)L_2]$  обладают более высокой цитотоксичностью, чем цисплатин и карбоплатин в отношении всех использованных клеточных линий.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90092.*

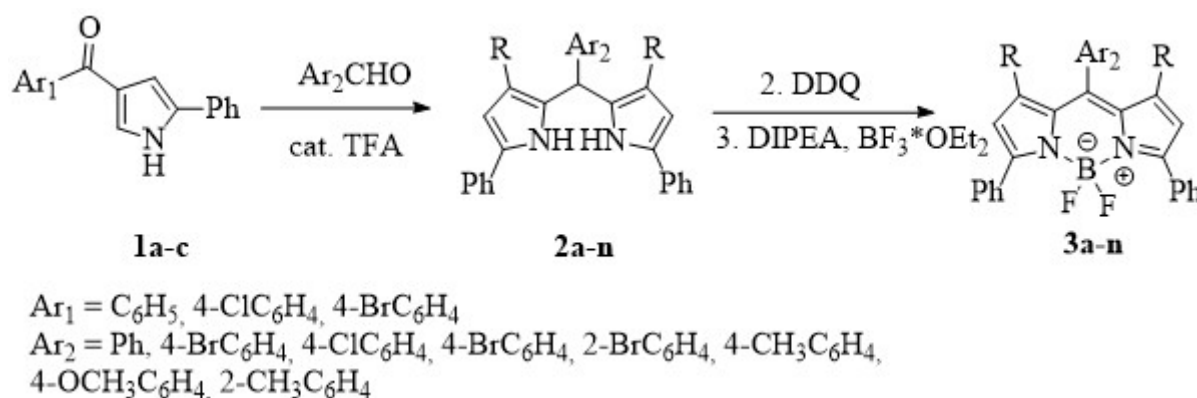
# СИНТЕЗ НОВЫХ БОРОДИПИРРОМЕТЕНОВ (BODIPY) И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ

**Ефимов И.В.,<sup>a</sup> Матвеева М.Д.,<sup>b</sup> Воскресенский Л.Г.<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Российский Университет Дружбы Народов, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6

<sup>b</sup>Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 29,  
e-mail: [ilya.efimov00@gmail.com](mailto:ilya.efimov00@gmail.com)

BODIPY - 4,4-дифтор-4-бор-3а,4а-диазиндацен - представляет собой функциональный краситель с малым сдвигом Стокса, поглощением и излучением в узкой области, высоким квантовым выходом флуоресценции, отсутствием чувствительность к полярности и pH, а также стабильной химической структурой<sup>1</sup>. Ранее было показано, что BODIPY генерируют активные формы кислорода при оптическом облучении и могут использоваться для инактивации выбранных белков или для индуцированного светом уничтожения клеток<sup>2</sup>.



**Схема 1.** Синтез BODIPY с ароматическими заместителями в 1,7-положениях.

Ранее, нами был разработан новый метод синтеза ранее не описанных 2,4-дизамещенных пирролов с различными ароматическими заместителями в 4 положении<sup>3</sup>. Полученные продукты были вовлечены в синтез BODIPY. Предложенная нами схема включает известную конденсацию исходного пиррола с альдегидом, дальнейшее окисление продукта **2a-n**, и циклизацию в присутствии DIPEA с  $\text{BF}_3\text{OEt}_2$  с образованием продукта **3a-n**. У всех полученных соединений были зарегистрированы спектры адсорбции и флуоресценции. Соединения показали высокое значение квантового выхода.

## Литература

- Müller B.J., Borisov S.M., Klimant I., *Adv. Funct. Mater.* 2016, **26**, 7697.
- Ji Y., Li-Jun X., Chen L., Guo X.-F., Wang H., Zhang H.-J., *Talanta*, 2018, **181**, 104.
- Efimov I.V., Matveeva M.D., Luque R., Bakulev V.A., Voskressensky L.G., *Eur. J. Org. Chem.*, 2020, **9**, 1108.

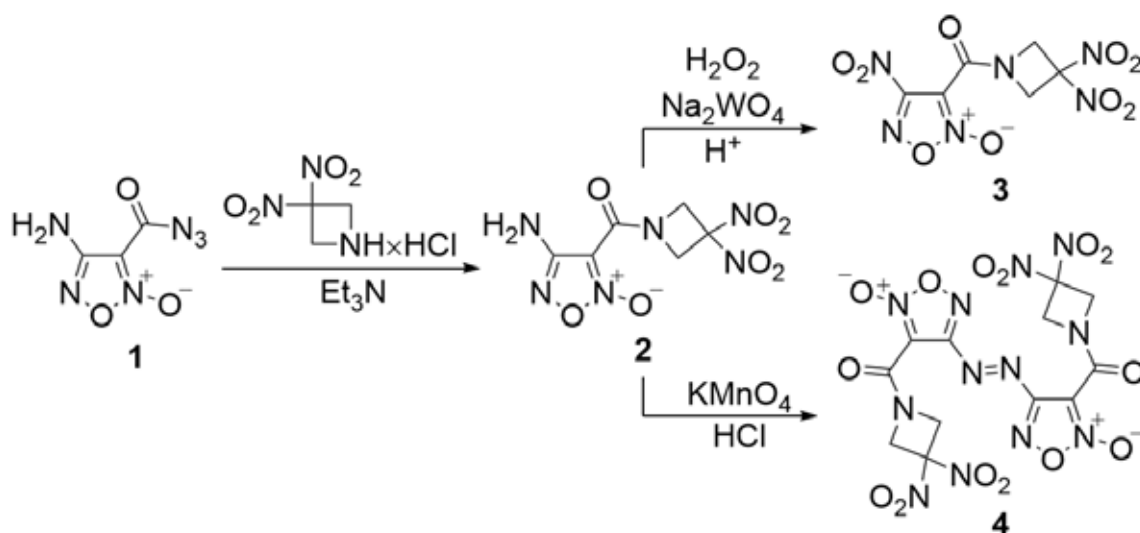
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-33-70074.

# ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КОМБИНАЦИИ ФУРОКСАНА И 3,3-ДИНИТРОАЗЕТИДИНА

[Жилин Е.С.](#), Ферштат Л.Л.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН  
119991, Москва, Ленинский проспект 47  
e-mail: eszhilin@gmail.com*

Азот-кислородные системы рассматриваются как перспективные энергоёмкие соединения и являются важнейшими функциональными высокоэнергетическими материалами (ВЭМ). Увеличение содержания азота и кислорода в одной молекуле приводит к улучшению его прикладных свойств, включающих повышение энтальпии образования и кислородного баланса, однако также может повысить чувствительность соединения к механическим воздействиям. Структурная функционализация ВЭМ играет ключевую роль в разработке новых высокоэнтальпийных соединений с оптимальными характеристиками, при этом комбинирование в одной молекуле различных гетероциклов рассматривается как наиболее привлекательная реализация такого подхода. В настоящей работе были синтезированы новые комбинации фуроксанового и 3,3-динитроазетидинового циклов на основе последовательных трансформаций 4-амино-3-азидокарбонилфуроксана **1**.



Синтетический подход включает в себя нуклеофильное замещение с участием 3,3-динитроазетидина и получением амида **2** с его последующим окислением до азо и нитропроизводных **3** и **4**, соответственно. Для синтезированных соединений **2-4** были проведены экспериментальные оценки физико-химических и детонационных параметров.

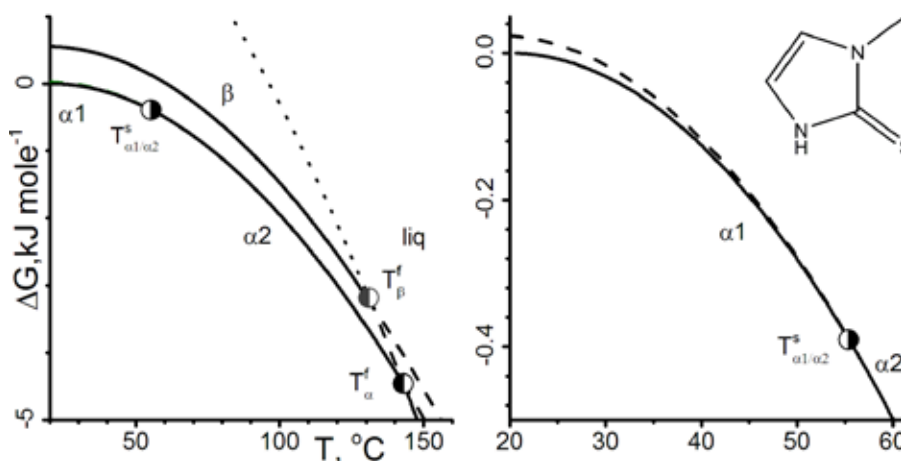
*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Министерства высшего образования и науки РФ (соглашение № 075-15-2020-803).*

# ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МЕЖФАЗНЫХ РАВНОВЕСИЙ И ТРАНСФОРМАЦИЙ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ МЕТИМАЗОЛА

Захарычев Д.В., Файзуллин Р.Р., Сайфина А.Ф., Лодочникова О.А.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова  
 ФИЦ Казанский научный центр РАН, 420088, г. Казань,  
 ул. Академика Арбузова, 8,  
 e-mail: dzakhar@iopc.ru*

Методом ДСК изучено термохимическое поведение лекарственного препарата метимазола. На основании полученных данных установлено, что метимазол образует две полиморфные кристаллические модификации -  $\alpha$ ,  $\beta$ . Соротношения свободных энергий составляющих систему фаз представлены в виде энергетической диаграммы.



Показано, что фаза  $\alpha$  термодинамически стабильна во всем температурном интервале, и существует в виде двух модификаций, между которыми в окрестности  $\sim 60^\circ\text{C}$  наблюдается обратимый твердотельный переход с низкой эффективной энтальпией ( $\sim 100$  Дж/моль). Данная трансформация может быть описана как фазовый переход второго рода. Установлено, что кристаллизации термодинамически стабильной  $\alpha$ -модификации предшествует образование метастабильной формы  $\beta$ , способной к быстрой спонтанной твердофазной трансформации в  $\alpha$ -фазу.

*Работа выполнена за счет средств гранта РНФ 17-13-01209*

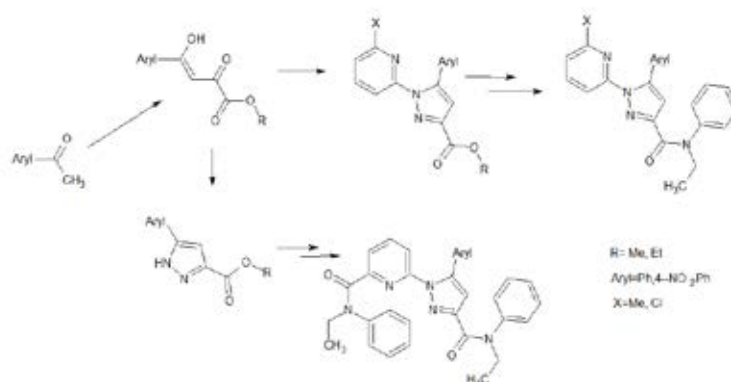
# НОВЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ 1-(2-ПИРИДИЛ)-ПИРАЗОЛА ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО СВЯЗЫВАНИЯ F-ЭЛЕМЕНТОВ

**Иванов А.В., Абрамова О.И., Борисова Н.Е., Матвеев П.И.**

*Химический факультет МГУ, 119991, Москва, Ленинские Горы д. 1, стр. 3  
e-mail: phthaliv@gamil.com*

Для эффективного связывания и группового разделения 4-f и 5-f-элементов применяются системы, содержащие жесткие (кислородные) и мягкие (азотные) центры связывания. Источником мягких центров обычно являются гетероциклические соединения (пиридин, 2,2'-бипиридил, 1,10-фенантролин и т.п.)<sup>1</sup>. Описано применение пиразол-пиридиновых структур для разделения пары европий-америций<sup>2</sup>. Однако, до настоящего времени в научно-технической литературе отсутствуют сведения об использовании в комплексообразовании с f-элементами пиразолпиридинов, содержащих кислородные сайты связывания.

Нами предложена и разработана удобная схема синтеза моно- и диамидов 1-(2-пиридил)-5-арилпиразол-3-карбоновых кислот, являющихся близкими структурными аналогами диамидов 2,2'-бипиридил 6,6'-дикарбоновой кислоты:



Взаимодействие полученных лигандов с солями лантаноидов и актининов привело к образованию комплексов с различным соотношением металл-лиганд. Состав и строение комплексов установлены на основании данных масс-спектрометрии и РСА.

Исследования экстракционной способности полученных соединений по отношению к паре европий-америций показало перспективность их использования в процессах разделения лантаноидов и актининов при переработке отработанного ядерного топлива.

## Литература

1. M. Alyapyshev, V. Babain, N. Borisova, I. Eliseev, D. Kirsanov, A. Kostin, A. Legin, M. Reshetova, Z. Smirnova, Polyhedron, **2010**, 29, 1998
2. Xiuying Yang, Dongping Su, Lianjun Song, Xueyu Wang, Qian Xiao, Qiuxia Feng, Songdong Ding. Separation and Purification Technology **2020**, V. 232, art. №115969.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект 20-73-10076).*



# ТЕТРА- И ОКТАЗАМЕЩЕННЫЕ БИСФТАЛОЦИАНИНЫ ЛЮТЕЦИЯ: ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ И СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА

Иванова В.Н., Басова Т.В.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения  
Российской академии наук, 630090, Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева 3,  
e-mail: vivanova@niic.nsc.ru*

Благодаря своим полупроводниковым свойствам, фталоцианины металлов (МРС) находят активное применение в качестве чувствительных слоёв электронных устройств, таких как транзисторы, диоды и химические сенсоры. МРС демонстрируют высокую химическую и термическую стабильность и растворимость в широком диапазоне органических и водных растворителей, поэтому тонкие пленки могут быть получены с помощью высокого вакуума и растворных технологий. Структура и свойства МРС и их пленок сильно зависят от замещения центрального атома металла или введения акцепторных или донорных заместителей в макрокольцо фталоцианина. Среди фталоцианинов металлов особое внимание многих исследователей привлекают бисфталоцианины лютеция ( $\text{LuPc}_2$ ), обладающих высокой собственной проводимостью и энергией активации до 0,5 эВ.

В данной работе были синтезированы и охарактеризованы тетра- и октазамещенные бисфталоцианины лютеция, содержащие (триоксиэтилен)гиа- и (триоксиэтилен)окси-соединения. Исследовано влияние гетероатома (S или O) и количества заместителей в макроциклах фталоцианина на их электрохимические свойства и реакцию сенсора на аммиак.

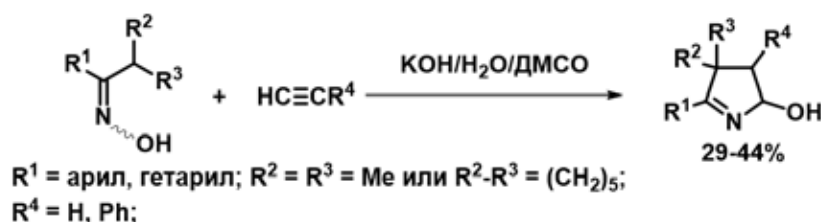
Пленки всех исследованных производных  $\text{LuPc}_2$  продемонстрировали обратимый хемирезистивный сенсорный отклик на аммиак (0,1-50 ppm) при комнатной температуре. Было показано, что пленки октазамещенных бисфталоцианинов лютеция демонстрируют более высокий хемирезистивный сенсорный отклик на аммиак по сравнению с тетразамещенными. В свою очередь, фталоцианины с (триоксиэтилен)окси-заместителями имели более высокий сенсорный отклик по сравнению с фталоцианинами с (триоксиэтилен)гиа-соединениями, что коррелирует с уменьшением значения  $\Delta E_{1/2}$ , полученным в результате электрохимических исследований. Максимальная чувствительность к аммиаку с расчетным пределом обнаружения 0,08 ppm наблюдалась для производного  $\text{LuPc}_2$ -4 с большим количеством заместителей OR.

# ДВУХСТАДИЙНЫЙ СИНТЕЗ 1,4-ДИГИДРОПИРИДАЗИНОВ ИЗ АЦЕТИЛЕНА, КЕТОКСИМОВ И ГИДРАЗИНОВ

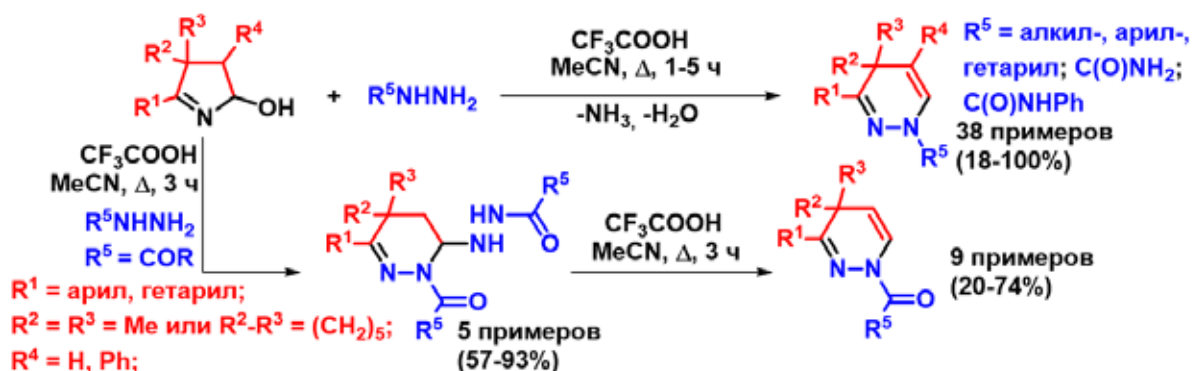
Иванова Е.Е.

ФГБУН Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН,  
664033, г. Иркутск, ул. Фаворского, д. 1,  
e-mail: ev\_zol@irioch.irk.ru

5-Гидроксипирролины превратились из экзотических соединений в доступный класс представителей пиррольного ряда благодаря разработке их синтеза из ацетиленов и *втор*-алкил(циклоалкил)кетоксимов в суперосновных средах.<sup>1</sup>



В докладе будет представлен селективный синтез 1,4-дигидропиридазинов на основе кислотно-каталитической рециклизации 5-гидроксипирролинов под действием гидразинов<sup>2</sup> и функциональных производных.<sup>3,4</sup>



## Литература

- Shabalin D.A., Dvorko M.Yu., Schmidt E.Yu., Protsuk N.I., Trofimov B. A. *Tetrahedron Lett.* **2016**, 57, 3156.
- Shabalin D. A., Dvorko M. Yu., Zolotareva E. E., Ushakov I. A., Vashchenko A.V., Schmidt E. Yu., Trofimov B. A. *Eur. J. Org. Chem.* **2017**, 4004.
- Shabalin D. A., Ivanova E. E., Kuzmin A. V., Dvorko M. Yu., Schmidt E. Yu., Trofimov B. A. *Synthesis*, **2018**, 50, 4982.
- Shabalin D. A., Ivanova E. E., Ushakov I.A., Schmidt E. Yu., Trofimov B. A. *Beilstein J. Org. Chem.*, **2021**, 17, 319.

# КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ 1-(1H-БЕНЗИМИДАЗОЛ-1ИЛ-МЕТИЛ)-1H-БЕНЗОТРИАЗОЛА И КОМПЛЕКСОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ЕГО ОСНОВЕ

Иванова Е.А.,<sup>а,б</sup> Смирнова К.С.,<sup>а</sup> Лидер Е.В.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup> Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 3

<sup>б</sup> Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 1  
e-mail: e.ivanova4@g.nsu.ru

Производные бензимидазола известны благодаря их широкому применению в фармакологии и медицине. В свою очередь редкоземельные металлы проявляют выраженные люминесцентные свойства. Объединив лиганд и лантанид в одном комплексном соединении, его можно использовать в качестве люминесцентной метки для визуализации молекулярных мишеней в клетках.

Получен и охарактеризован ряд координационных соединений лантанидов(III) с 1-(1H-бензимидазол-1ил-метил)-1H-бензотриазолом. С помощью рентгеноструктурного анализа установлены структуры полученных комплексов и показана монодентатная и бидентатно-мостиковая координация лиганда атомами азота бензимидазольного и бензотриазольного циклов.

Исследования фотолюминесцентных свойств показало, что лиганд обладает флюоресценцией, зависящей от длины волны возбуждения. В спектрах эмиссии комплексов наблюдается полный или частичный перенос энергии с триплетного уровня лиганда на эмиссионный уровень металла. При этом время жизни возбужденного состояния увеличивается, что приводит к фосфоресценции.

Квантово-химические расчеты показали, что при переносе энергии в лиганде происходят  $\pi$ - $\pi^*$  переходы с фрагмента бензимидазольного кольца на бензотриазольное (рис. 1).

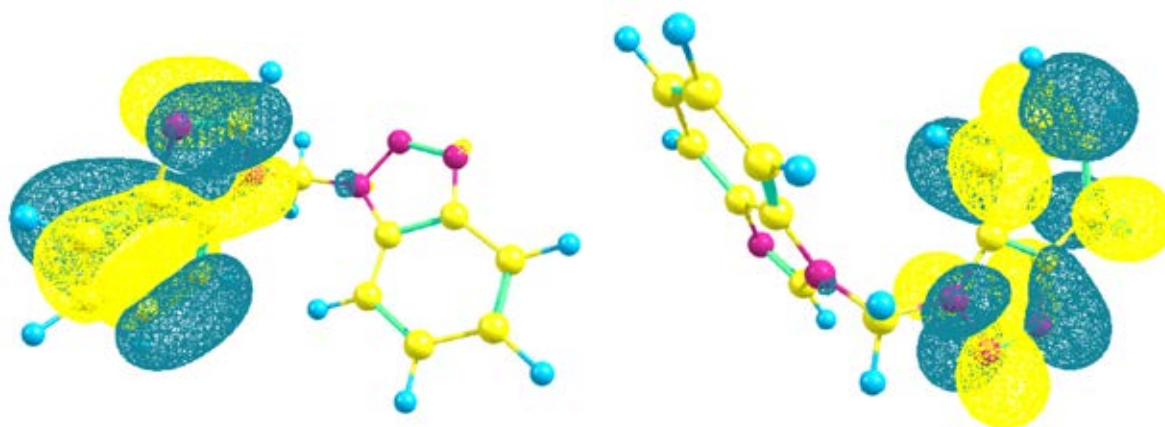


Рисунок 1. Рассчитанные НОМО (слева) и LUMO (справа) для лиганда.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-73-10207).

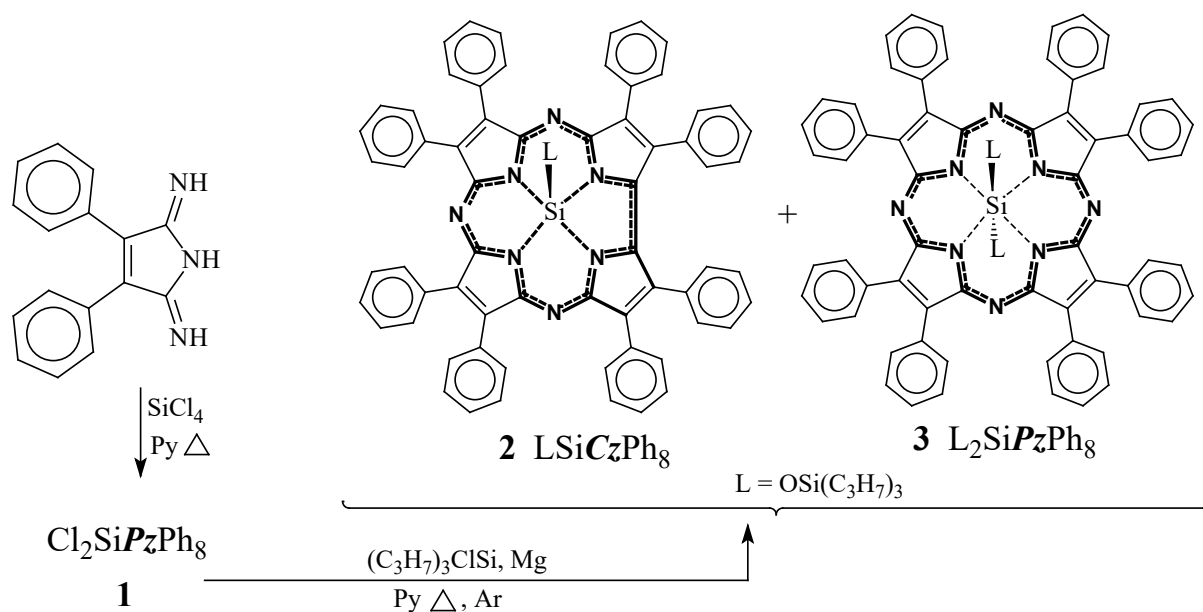
# СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКА ПОРФИРАЗИНОВ И КОРРОЛАЗИНА КРЕМНИЯ(IV)

**Иванова С.С., Морева М., Романов К., Стужин П.А.**

*Ивановский государственный химико-технологический университет,  
153000 Иваново, Шереметевский проспект 7  
e-mail: svsviv@isuct.ru*

Порфиразины (Pz) – макрогетероциклические соединения, состоящие из четырех пиррольных колец, соединенных через *мезо*-атом азота. Соединения тетрабензопорфиразинов с кремнием(IV) перспективны для использования в различных областях, таких как катализ, технология органических солнечных элементов или фотодинамическая терапия<sup>1,2</sup>. Модификация Pz макроцикла путем его сжатия за счет удаления одного *мезо*-атома азота с образованием корролазина (Cz) сильно изменяет спектральные свойства макроциклического хромофора, влияет на его фотофизическое, электрохимическое поведение (см., например,<sup>3</sup>).

В данной работе при платинотетрамеризации диминоимидадифенилмалеиновой кислоты впервые получен Si(IV) октафенилпорфиразин **1**, и на его основе – трипропилсилоксанзамещенные корролазин **2** и порфиразин **3**. Рассматриваются спектральные свойства полученных соединений, а также влияние «сжатия» макроцикла (Pz→Cz) на их фото-химические свойства и способность к генерации синглетного кислорода.



## Литература

1. X.-F. Zhang, *Coord. Chem. Rev.*, **2015**, 285, 52-64.
2. E. van de Winckel, et al., *Dyes and Pigments*, **2017**, 145, 239e245.
3. H. Raboui, A.J. Lough, A.M. Szawiola, T.P. Bender, *Inorg. Chem.*, **2018**, 57, 5174–5182.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-53-26004*

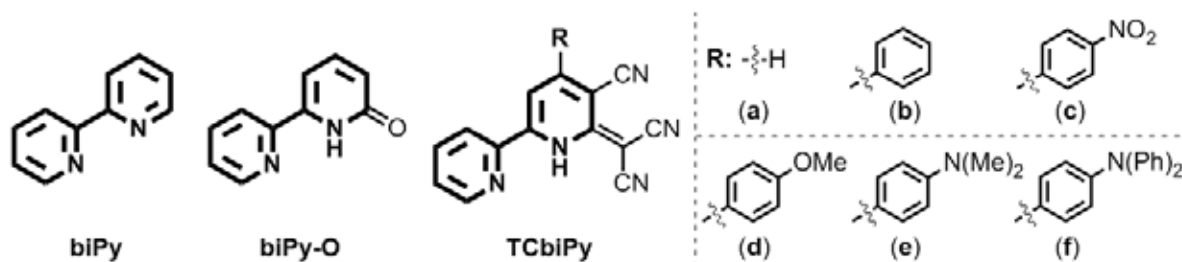
# ТРИЦИАНОЗАМЕЩЕННЫЕ 2,2'-БИПИРИДИНЫ – НОВЫЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ ХЕМОСЕНСОРЫ

Иевлев М.Ю., Майоров Н.С., Шишликова М.А.

Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова,  
 428015, Чебоксары, Московский проспект 15,  
 e-mail: hiliam@bk.ru

2,2'-Бипиридин (**biPy**) и его производные – одни из самых известных и широко используемых органических лигандов в координационной химии<sup>1</sup>. Особый интерес представляют бипиридиновые структуры со свободным NH-фрагментом. Например, пиридин-пирид-2-оны (**biPy-O**) зарекомендовали себя в качестве эффективных флуоресцентных хемосенсоров для определения ионов цинка и кадмия<sup>2</sup>.

Производные дицианометилден-1,2-дигидропиридина (**TCbiPy**) можно считать аналогами пирид-2-онов (**biPy-O**). Электроноакцепторный эффект дицианометилденевого фрагмента сравним с влиянием оксогруппы, а наличие экзоциклической двойной связи сохраняет возможность для таутомерии. Присутствие дополнительной цианогруппы в третьем положении скелета **TCbiPy** еще больше повышает кислотность NH-фрагмента и способствует образованию устойчивых координационных структур с металлами и аминами, люминесцентные свойства которых будут напрямую зависеть от природы катиона, а значит могут быть использованы для его детектирования и количественного определения.



Нами предложен оригинальный подход к синтезу ранее неизвестных цианозамещенных производных 2,2'-бипиридина (**TCbiPy**), изучены их спектрально-флуоресцентные свойства, а также выявлена возможность селективного определения катионов меди в водно-органической среде.

## Литература

1. Constable E.C., Housecroft C.E. *Molecules*, 2019, **24**, 3951.
2. Hagimoria M., Mizuyama N., Tominaga Y. et al. *Dyes and Pigments*, 2015, **113**, 205

Исследование выполнено в рамках гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых, проект МК-708.2021.1.3, соглашение № 075-15-2021-082.

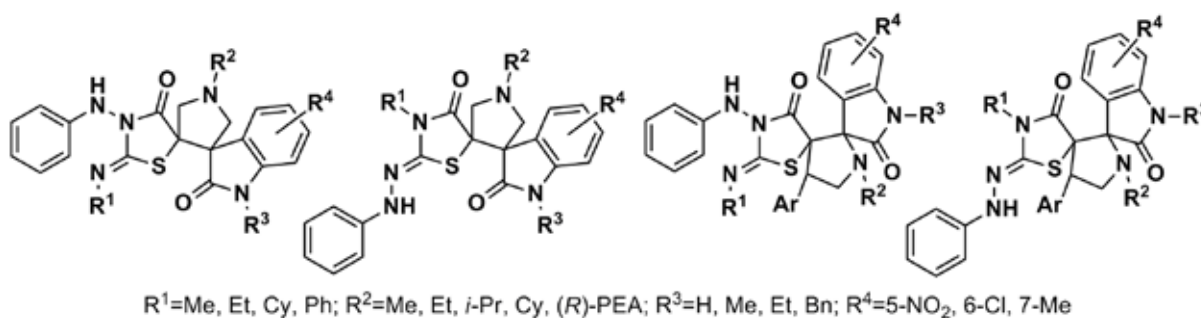
# РЕГИОСЕЛЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ ТИАЗОЛИДИН-4-ОНОВ И ИХ ДИСПИРОПРОИЗВОДНЫХ

Изместьев А.Н., Газиева Г.А.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: nebeli@mail.ru*

Значительную группу фармакологически активных тиазолидин-4-онов составляют продукты их альдольной конденсации с изатинами и ароматическими альдегидами<sup>1</sup>, интенсивное изучение которых определяется и возможностью получения на их основе различных диспирочлененных тиазолидин-пирролидин-индолов, являющихся структурными аналогами ряда природных алкалоидов, таких как хорсфилин и элакомин, а также противоопухолевых препаратов класса диспироиндолоидов<sup>2</sup>.

Настоящая работа посвящена разработке региоселективных подходов к получению тиазолидин-4-онов по реакции 1,4-дизамещенных тиосемикарбазидов с этилхлорацетатом, а также синтезу на их основе диастеремерно чистых диспиропроизводных, основанному на трехкомпонентной реакции [3+2]-диполярного циклоприсоединения оксиндол- и арилметиленпроизводных тиазолидин-4-онов с азометиновыми илидами.



По результатам работы получена представительная серия исходных метиленактивных тиазолидин-4-онов, их оксиндол- и арилметиленпроизводных, а также разнообразных по строению диспиро(тиазолидин-пирролидин-индолов) с хорошими выходами.

## Литература

1. Tomasic T., Masic L. P. *Curr. Med. Chem.*, 2009, **16**, 1596.
2. Maheswari S.U., Balamurugan K., Perumal S., Yogeewari P., Sriram D. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 2010, **20**, 7278.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ, проект 20-03-00765*

# СИНТЕЗ ПЯТИ- И ШЕСТИЧЛЕННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ ИЗ 4-ГИДРОКСИ-3,5-ДИ-ТРЕТ-БУТИЛФЕНИЛГЛИОКСАЛЯ

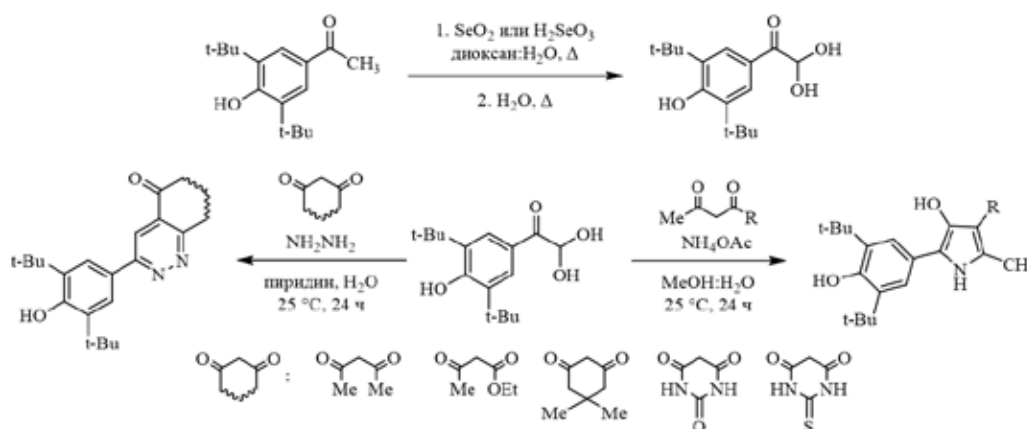
**Ильков К.В.,** Гладких А.А., Кошелев В.Н.

РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, 119991, Москва, Ленинский проспект, 65  
 e-mail: [ilkov.k@gubkin.ru](mailto:ilkov.k@gubkin.ru)

Арилглиоксали являются привлекательными синтонами для синтеза гетероциклических соединений. Обладают высокой реакционной способностью, что позволяет получать широкий круг гетероциклических соединений с различными свойствами<sup>1</sup>.

Ранее неописанный 4-гидрокси-3,5-ди-*трет*-бутилфенилглиоксаль получен при кипячении соответствующего ацетофенона с диоксидом селена<sup>2</sup> или с селенистой кислотой<sup>3</sup> в водном диоксане с выходами 76 и 87% соответственно.

Реакция арилглиоксала с СН-кислотами – 1,3-дикетонами – и источником азота приводит к образованию пяти- или шестичленных гетероциклов. Использование ацетата аммония в данной реакции приводит к замещённым пирролам. При использовании гидразин гидрата получаются пиридазины. В данной работе получен ряд соединений при использовании ацетилацетона, ацетоуксусного эфира, димедона, барбитуровой и тиобарбитуровой кислот.



Для синтезированных соединений исследована антиокислительная активность спектрофотометрическим методом ABTS, а также железовосстанавливающая способность методом FRAP.

## Литература

1. Eftekhari-Sis B., Zirak M., Akbari A. *Chemical reviews*, 2013, 113, 5, 2958.
2. Riley H., Gray A. *Organic Syntheses*, 1943, 15, 67.
3. Saldabol N., Popelis J., Slavinska V. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 2002, 38, 783.



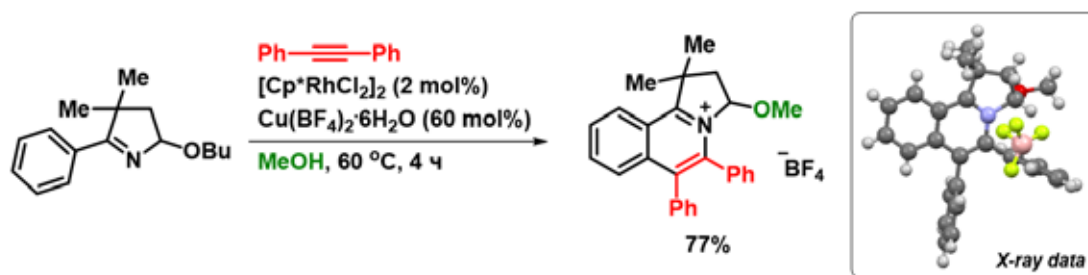
# ОСОБЕННОСТИ РОДИЙ-КАТАЛИЗИРУЕМОЙ C-H ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ/N-АННЕЛИРОВАНИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ 2-АРИЛПИРРОЛИНОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ АЦЕТИЛЕНОВ

Казак М.К., Шабалин Д.А.

Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук,  
664033, Иркутск, ул. Фаворского 1,  
e-mail: shabalin.chemistry@gmail.com

Одной из важных вех, кардинально изменивших методологию органического синтеза, стало появление металлокомплексного катализа. В последние годы значительные успехи были достигнуты в синтезе экзотических гетероциклических систем с использованием комплексов родия.<sup>1</sup> Стоит отметить, что легкодоступный комплекс родия, а именно димер хлорида пентаметилциклопентадиенил родия (III),  $[\text{Cp}^*\text{RhCl}_2]_2$ , обычно демонстрирует высокую каталитическую активность и селективность, поэтому основное внимание исследователей направлено на установление границ применимости подобных превращений путем вовлечения субстратов различной природы.

Недавно нами разработаны удобные методы синтеза замещенных 2-арилпирролинов на основе реакции *втор*-алкиларилкетоксимов с ацетиленом в суперосновной системе КОН/ДМСО с последующей обработкой образующихся 5-гидрокси-2-арилпирролинов или 2-арил-3*H*-пирролов соответствующими нуклеофильными реагентами.<sup>2,3</sup> В докладе обсуждаются первые результаты родий-катализируемого синтеза конденсированных изохинолиниевых солей из замещенных 2-арилпирролинов и ацетиленов.



## Литература

1. Santhoshkumar R., Cheng C.-H., *Chem. Eur. J.*, 2019, **25**, 9366.
2. Dvorko M.Yu., Shabalin D.A., Schmidt E.Yu., Ushakov I.A., Trofimov B.A. *Eur. J. Org. Chem.*, 2017, 4609.
3. Shabalin D.A., Kuzmin A.V., Schmidt E.Yu., Trofimov B.A. *Eur. J. Org. Chem.*, 2019, 2305.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-73-00008.



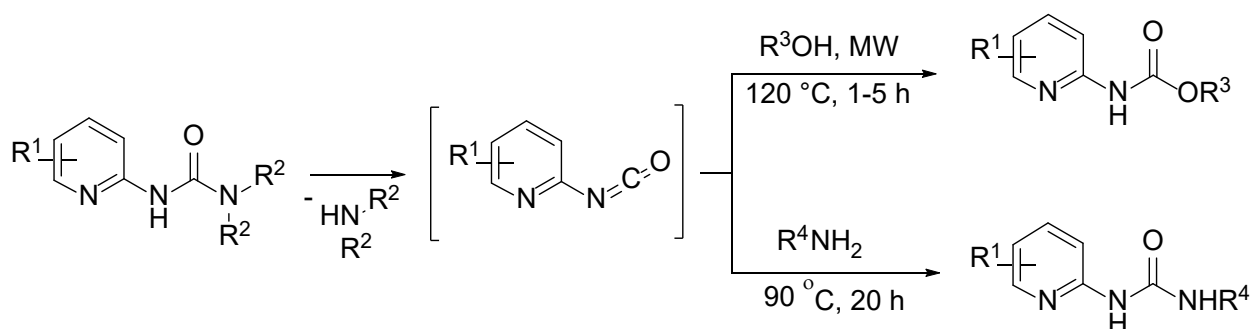
## N-АЗИНИЛМОЧЕВИНЫ В РЕАКЦИЯХ С O- И N-НУКЛЕОФИЛАМИ

**Касаткина С.О., Байков С.В., Боярский В.П.**

*Санкт-Петербургский государственный университет, 198504, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект, дом 26. Институт химии СПбГУ  
e-mail: s.kasatkina@spbu.ru*

Самые распространённые методы синтеза замещённых мочевины и карбаматов основаны на использовании изоцианатов, являющихся ценными и реакционноспособными электрофильными реагентами. Однако данные соединения чрезвычайно токсичны для организма человека, в первую очередь, для органов дыхания. В связи с этим актуальным является поиск альтернативных реагентов – «скрытых» изоцианатов. В частности, в работе Ллойд-Джонса и Букер-Милберна<sup>1</sup> было показано, что в роли «скрытых» арилизоцианатов способны выступать *N,N*-диалкил-*N'*-арилзамещённые мочевины.

В развитие этой концепции мы изучили реакционную способность *N,N*-диалкил-*N'*-гетарилмочевин, содержащих пиридиновый, хинолиновый и изохинолиновый фрагменты. При нагревании данных соединений с алифатическими спиртами в микроволновом реакторе нами был получен широкий круг *N*-азинилкарбаматов<sup>2</sup>, а при реакции с небольшим избытком первичного амина – соответствующие несимметричные мочевины.



### Литература

- Hutchby M., Houlden C.E., Ford J.G., Tyler S.N.G., Gagné M.R., Lloyd-Jones G.C., Booker-Milburn K.I. *Angewandte Chemie International Edition*, 2009, **48**, 8721.
- Kasatkina S.O., Geyl K.K., Baykov S.V., Boyarskaya I.A., Boyarskiy V.P. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 2021, в печати. DOI: 10.1039/D1OB00783A.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-13-00008. Все физико-химические измерения проводились в Научном парке Санкт-Петербургского государственного университета (РЦ «Магнитно-резонансные методы исследования», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Методы анализа состава вещества»).*

# НОВЫЕ ЭФИРЫ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ ФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ЭКСТРАГЕНТЫ F-ЭЛЕМЕНТОВ

[Кирсанова А.А.](#), Борисова Н.Е., Матвеев П.И.

*Химический факультет МГУ, 119991, Москва, Ленинские Горы д. 1, стр. 3  
e-mail: kirsana96@mail.ru*

N,O-донорные лиганды – перспективный класс экстрагентов для разделения актинидов и лантаноидов в ядерном топливном цикле. Описано применение тетраэтил- и тетрабутилфосфонатов 1,10-фенантролина для разделения смеси Am(III)/Ln(III). Однако, сведения о влиянии природы заместителей в сложноэфирной группе гетероциклических фосфонатов на их комплексообразование с *f*-элементами отсутствуют. Нами синтезирован ряд новых эфиров гетероциклических фосфоновых кислот на основе пиридина, бипиридина и фенантролина с различными заместителями:

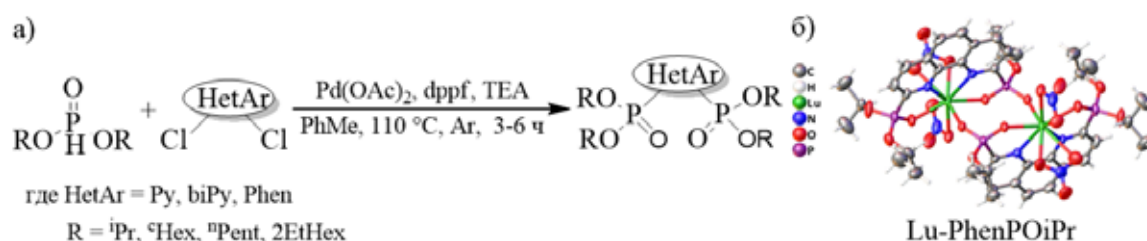


Рисунок 1. а) схема синтеза лигандов; б) структура одного из комплексов  $M^{n+}$ -лиганд.

В ходе реакции полученных лигандов с солями лантаноидов выделены комплексы с различным соотношением металл-лиганд. Их состав и строение установлены на основании данных масс-спектрометрии и РСА (Рисунок 1б). Селективность фенантролиновых лигандов в разделении пары Am(III)/Eu(III) показывает высокий потенциал указанных эфиров и делает целесообразным их прикладные радиохимические исследования.

Таблица 1. Коэффициенты разделения Am/Eu при различных  $c(\text{HNO}_3)$ .  $T = 25 \pm 1$  °C,  $c(\text{PhenPO}) = 0,002$  М в мета-нитробензотрифториде (Ф-3).

Лиганд	$c(\text{HNO}_3)$ , М				
	0,5	1	2	3	4
PhenPOiPr	8	8	10	13	10
PhenPOcHex	14	10	14	12	10

## Литература

1. X. Yang, L. Xu, Y. Hao, R. Meng, X. Zhang, L. Lei, and C. Xiao, *Inorg. Chem.* 2020, **59**, 23, 17453–17463.

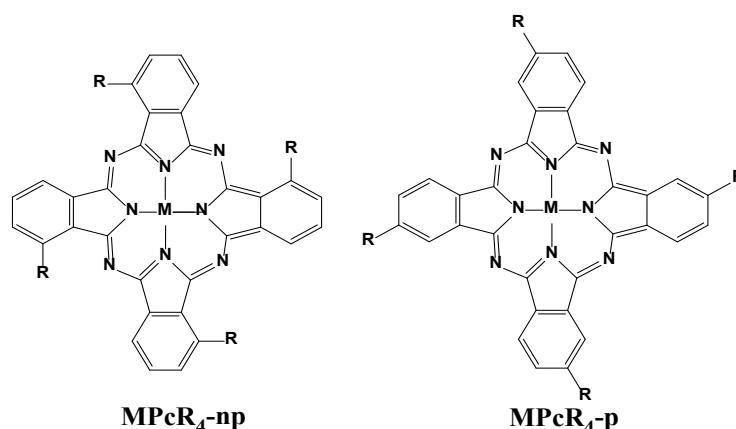
*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-73-10076.*

# ВЛИЯНИЕ ПОЛОЖЕНИЯ ФТОР-ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ ВО ФТАЛОЦИАНИНОВОМ КОЛЬЦЕ НА СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ТЕТРАФТОРЗАМЕЩЕННЫХ ФТАЛОЦИАНИНОВ МЕТАЛЛОВ

**Клямер Д.Д., Бонегардт Д.В., Сухих А.С.**

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского Отделения Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева 3,  
e-mail: klyamer@niic.nsc.ru, klyamerdarya@yandex.ru*

Пленки фталоцианинов металлов (МРС) широко исследуются как активные слои адсорбционно-резистивных сенсоров для определения низких концентраций различных газов ( $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{NO}$  и др.), при этом фторзамещенные комплексы обладают большим сенсорным откликом по сравнению с незамещенными аналогами. Известно, что можно оптимизировать и изменять сенсорные свойства фталоцианинов путем варьирования молекулярной структуры комплекса, а именно при введении различных заместителей в различные положения во фталоцианиновом кольце (рис. 1) и варьировании типа металла-комплексобразователя.



*Рисунок 1. Структуры тетразамещенных фталоцианинов металлов с заместителями в непериферийных (MPcF<sub>4</sub>-np) в периферийных (MPcF<sub>4</sub>-p) положениях.*

В работе были синтезированы комплексы  $\text{MPcF}_4$  ( $\text{M} = \text{Co}, \text{Cu}, \text{Zn}, \text{Pd}, \text{Fe}, \text{VO}, \text{Pb}$ ), получены их пленки методом физического осаждения из газовой фазы и охарактеризованы рядом физико-химических методов. Проведено исследование сенсорного адсорбционно-резистивного отклика пленок тетрафторзамещенных фталоцианинов металлов с F-заместителями в различных положениях. На основе сравнительного анализа результатов исследования были выбраны материалы, обладающие лучшими сенсорными характеристиками (селективность, воспроизводимость, времена отклика и релаксации и др.).

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-73-10142.*

# МЕТОДЫ МОДИФИКАЦИИ КЕТОГРУППЫ И ОКСИМНОГО ФРАГМЕНТА ОКСИМА 11Н-ИНДЕНО[1,2-В]ХИНОКСАЛИН-11-ОНА И ТРИПТАНТРИНА

Коврижина А.Р., Кузнецов А.А., Самородова Е.И., Хлебников А.И.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
пр. Ленина, д. 30, 634050 Томск, Россия  
E-mail: anaskowry@gmail.com

Азотосодержащие гетероциклические соединения играют важную роль в фармакологии и медицине. Ранее нами было обнаружено, что оксим 11Н-индено[1,2-в]хиноксалин-11-она и триптантрин-6-оксим ингибируют с-Jun N-терминальную киназу (JNK), которая, в свою очередь, участвует в патогенезе сердечно-сосудистых заболеваний<sup>1</sup>. В данной работе представлен синтез неизвестных ранее *O*-замещенных производных инденохиноксалинона и триптантрин-6-оксима. Также впервые были получены альдазины на основе гетероциклической системы инденохиноксалинона в качестве перспективных биологически активных соединений.

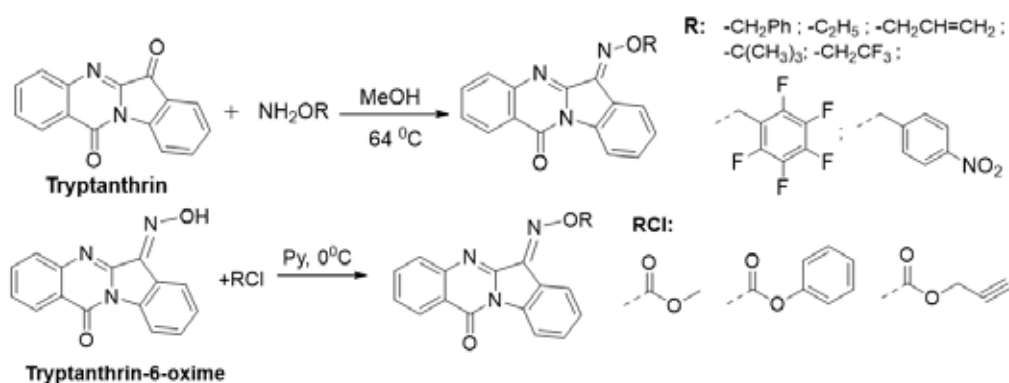


Рисунок 1. Синтез производных триптантрин-6-оксима и его оксима.

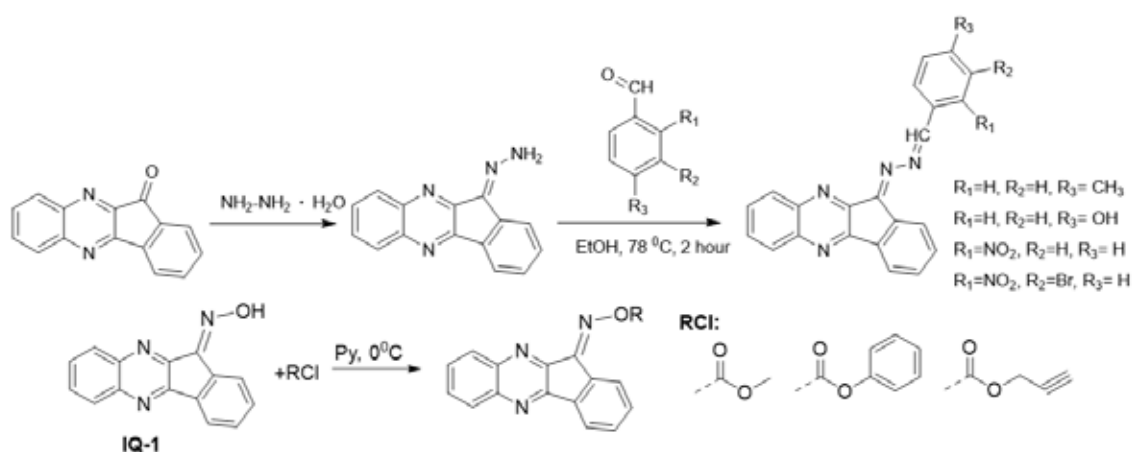


Рисунок 2. Синтез производных 11Н-индено[1,2-в]хиноксалин-11-она и его оксима (IQ-1).

## Литература

1. Schepetkin I.A et al. *Eur. J. Med. Chem.* 2019, **161**, 179-191.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 17-15-01111.

# СТАТЬИ ПО ХИМИИ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА СТРАНИЦАХ ЖУРНАЛА «ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК. СЕРИЯ ХИМИЧЕСКАЯ» (RUSSIAN CHEMICAL BULLETIN)

Коннова Г.Н., Боганова Л.И.

*ИОХ РАН, Москва, РФ*

*Рукописи следует направлять в редакцию журнала по адресу:*

*incoming@ioc.ac.ru; тел. редакции: +7(499) 137-6997*

*e-mail: izvan@ioc.ac.ru*

В докладе представлена информация об основных требованиях, которые журнал предъявляет к рукописям, а также рассмотрены перспективы развития журнала и возможности продвижения опубликованных статей с целью повышения наукометрических показателей российских авторов и научных организаций.

Журнал «Известия Академии наук. Серия химическая» основан в 1936 г. и с 1952 г. переводится на английский язык. В настоящее время издание английской версии журнала «Russian Chemical Bulletin» осуществляет издательство Springer and Business Media, Inc. Журнал выходит в печатном и электронном видах. Электронная русскоязычная версия доступна на сайте e-library ([www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru), с 1966 г.), англоязычная – на сайте Springer (<https://link.springer.com/journal/11172>, с 1952 г.). Ежегодно публикуется не менее 350 статей из 130 российских и зарубежных научных центров. Журнал включен в список журналов ВАК, индексируется и реферировается ведущими реферативными журналами, в том числе Science Citation Index, SciSearch, Journal Citation Reports/Science Edition, SCOPUS, CAS, ChemWeb и другими научными базами данных. Импакт-фактор журнала составляет 1.062 за 2019 г. В редколлегию журнала и в международный редакционный совет входят всемирно известные ученые. Высокое качество статей достигается в результате тщательного отбора материала путем двойного рецензирования и научного редактирования при подготовке рукописи к публикации. Хорошо подготовленные статьи публикуются за 2-4 месяца.

В настоящее время одним из приоритетных направлений деятельности журнала является повышение наукометрических показателей авторов и российских научных организаций. В этой связи редколлегия журнала призывает авторов активно ссылаться на свои статьи, а также на статьи своих российских коллег, опубликованные в журналах (особенно российских) в течение последних двух лет, следующих за годом публикации, поскольку именно этот период оказывает наибольшее влияние на наукометрические показатели.

В журнале публикуются обзоры, аналитические и исследовательские статьи, а также краткие сообщения. Тематика журнала охватывает все направления химической науки и смежных областей, в том числе химию гетероциклических соединений, современные каталитические методы синтеза, физико-химические методы синтеза, медицинскую химию, химию материалов. Журнал выпускает специализированные номера, в частности по материалам конференций. Редакция журнала приглашает участников Всероссийского конгресса по химии гетероциклических соединений принять участие в подготовке специализированного выпуска журнала, представив интересный материал, не опубликованный ранее и отражающий фундаментальные исследования в химии координационных соединений и междисциплинарных областях.

# ПОЛУЧЕНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ 1,4-ДИГИДРОПИРИДИНА, СОДЕРЖАЩИХ ТИОТЕТРАФТОРФЕНИЛЬНЫЕ ЗАМЕСТИТЕЛИ

**Кощеев Б.В., Максимов А.М., Виноградов А.С.**

ФГБУН Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН,  
630090, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева 9,  
e-mail: koscheev@nioch.nsc.ru

Ряд производных 1,4-дигидропиридина, содержащих галогенарильный заместитель в положении 4, таких как Амлодипин, Клевидипин и Риодипин, являются антагонистами ионов кальция, благодаря чему такие соединения используются в медицине в качестве гипотензивных препаратов<sup>1,2,3</sup>. Ранее исследовалось поведение в качестве антагонистов кальция 4-фенил-1,4-дигидропиридинов, содержащих в бензольном кольце тиометильную группу или атомы фтора<sup>4</sup>. При этом дифторсодержащие соединения показали более высокие антигипертензивные свойства по сравнению с монофторированными аналогами<sup>5</sup>. В связи с этим представляет интерес получение дигидропиридинов, содержащих большее количество атомов фтора и одновременно атом серы, несущий различные заместители, а также изучение гипотензивных свойств таких соединений. В качестве исходных соединений для синтеза указанных структур использовались 4-(алкил- или арилтио)тетрафторбензальдегиды. Их конденсация с ацетоуксусным эфиром и этил-3-аминокротонатом дала целевые соединения с хорошими выходами (Схема 1).

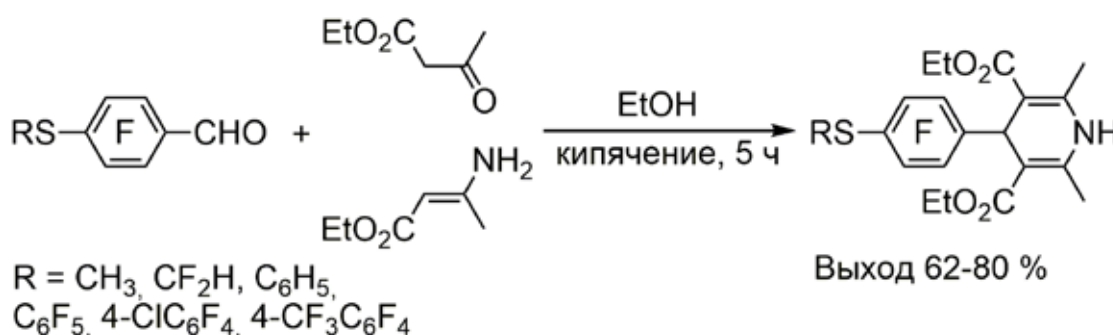


Схема 1. Синтез 4-[4'-алкил(арил)тиотетрафторфенил]-1,4-дигидропиридинов

## Литература

1. Mostafa N.S., AbdelHamid G., Zaazaa H.E., Amer S.M. *Chemical Papers*, 2019, **73**, 2427.
2. Wang J., McDonagh D.L., Meng L. *American Journal of Cardiovascular Drugs*, 2021, **21**, 35.
3. Mishra A.P., Bajpai A., Rai A.K. *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, 2019, **19**, 1219.
4. Chang C.C., et al. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2010, **18**, 3147.
5. Hernandez-Galleros Z., et al. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 1995, **30**, 355.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Новосибирской области в рамках научного проекта № 20-43-543026

# СПИРООКСИНДОЛЫ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ИНГИБИТОРЫ БЕЛОК-БЕЛКОВОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ MDM2-P53: СИНТЕЗ И БИОАКТИВНОСТЬ

**Кравцова А.А., Кириллова Е.А., Будицина Е.М.**

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
 химический факультет, 119234, Москва, Ленинские горы 1с3  
 e-mail: [kravtsovaanna95@gmail.com](mailto:kravtsovaanna95@gmail.com)

Среди низкомолекулярных соединений спирооксиндолы являются перспективными кандидатами для разработки противоопухолевых препаратов. При этом особое место занимают спиро[оксиндол-3,3 $\epsilon$ -пирролидины], для которых обнаружена способность ингибировать взаимодействие белков p53 и MDM2.<sup>1</sup>

Нами был разработан новый метод синтеза спиро[оксиндол-3,3 $\epsilon$ -пирролидинов] **6** на основе каскада реакций Штаудингера, *aza*-реакции Виттига и реакции Манниха с последующим удалением защитной группы (Рис. 1). Этот метод позволяет получать целевые гетероциклы **6** с высокой диастереоселективностью и хорошими выходами.<sup>2</sup>

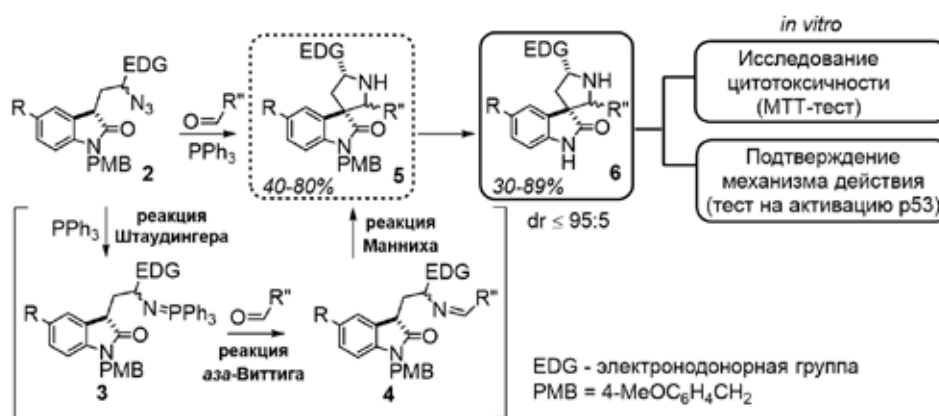


Рисунок 1. Стратегия работы

В данной работе также были проведены исследования цитотоксичности синтезированных спиро[оксиндол-3,3 $\epsilon$ -пирролидинов] **6** и эксперименты по установлению механизма действия *in vitro* по отношению к раковым клеткам нескольких линий.

## Литература

- Ding K., Lu Y., Nikolovska-Coleska Z. et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2005, **127**, 29, 10130.
- Акаев А.А., Кравцова А.А., Кириллова Е.А., Будицина Е.М., Мельников М.Я. *Патент 2730287 РФ*, 2020



# СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ ХИРАЛЬНЫХ 2,6-ДИЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,5-ДИАЗАЦИКЛООКТАНА

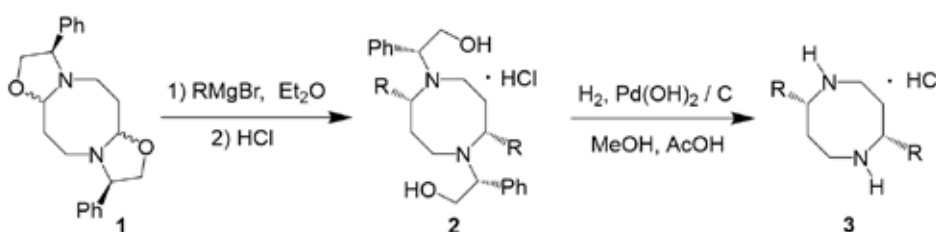
**Кузнецов Д.Р.,<sup>а</sup> Федорова Д.Р.,<sup>а</sup> Герасимова Д.П.,<sup>а</sup> Япрынцева О.А.,<sup>а</sup>  
Лодочникова О.А.,<sup>а</sup> Танака К.,<sup>а,б</sup> Курбангалиева А.Р.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
420008, Казань, ул. Кремлевская 18,  
e-mail: drkuznecov@stud.kpfu.ru

<sup>б</sup>Кластер новаторских исследований RIKEN, 2-1 Хиросава, г. Вако,  
Сайтама 351-0198, Япония

Ранее было показано, что  $\alpha,\beta$ -ненасыщенные имины, образующиеся при взаимодействии акролеина с аминами и производными 1,2-этаноламина, могут участвовать в реакции [4+4]-димеризации по типу «голова к хвосту» и образовывать продукты ряда 2,6,9-триазабициклононана и диоксазолидино[1,5]-диазациклооктана<sup>1</sup>. Последние являются доступными исходными веществами для получения *N*-гетероциклов класса 1,5-диазациклооктана, которые привлекательны как лиганды в комплексах переходных металлов, стартовые и промежуточные вещества в тонком органическом синтезе, а также как перспективные объекты биоскрининговых исследований.

Нами разработан удобный метод синтеза<sup>2</sup> хиральных 2,6-дизамещенных производных 1,5-диазациклооктана **3**, основанный на реакции алкилирования продуктов взаимодействия **1** акролеина с (*R*)-(-)-2-фенилглицинолом и последующем каталитическом гидрогенолизе полученных гетероциклов **2**. В различных реакциях *N*-функционализации гетероциклов **3** получены новые оптические активные производные 1,5-диазациклооктана.



## Литература

1. Pradipta A.R., Latypova L., Chulakova D., Smirnov I., Kurbangaliev A., Tanaka K. *Heterocycles*, 2018, **97**, 668.
2. Chulakova D.R., Pradipta A.R., Lodochnikova O.A., Kuznetsov D.R., Bulygina K.S., Smirnov I.S., Usachev K.S., Latypova L.Z., Kurbangaliev A.R., Tanaka K. *Chem. Asian J.*, 2019, **14**, 4048.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности № 0671-2020-0063.



# РЕАКЦИИ 1-(2,2-ДИМЕТОКСИЭТИЛ)МОЧЕВИН С С- И Р-НУКЛЕОФИЛАМИ: РЕГИОСЕЛЕКТИВНЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА НОВЫХ ИМИДАЗОЛИДИН-2-ОНОВ

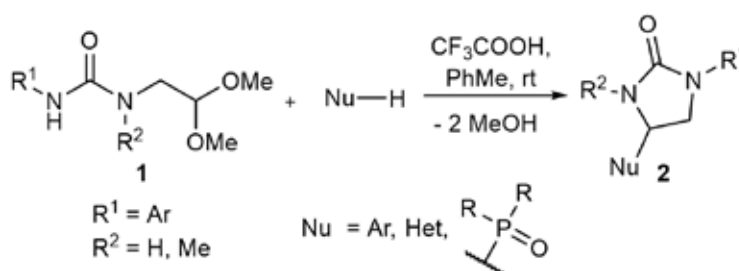
[Кузнецова Е.А.](#),<sup>а,б</sup> Маврин А.А.<sup>б</sup>, Смолобочкин А.В.<sup>а</sup>, Газизов А.С.<sup>а</sup>, Бурилов А.Р.<sup>а</sup>, Пудовик М.А.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> *Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова ФИЦ  
Казанский научный центр РАН, 420029, Казань, Академика Арбузова, 8*

<sup>б</sup> *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»,  
420015, Казань, Карла Маркса, 68  
e-mail: lizaveta1406@icloud.com*

Циклические мочевины широко применяются в медицинской химии. Особый интерес вызывают производные имидазолидин-2-она, входящие в состав антибиотика Азлоциллина, используемого для лечения тревожных расстройств Эмисерфонта и др. Поэтому, неудивительно, что разработка методов синтеза имидазолидинов является актуальной задачей.

Нами разработан региоселективный метод синтеза производных имидазолидин-2-она **2**, содержащих в четвёртом положении ароматические, гетероциклические и фосфорорганические фрагменты, на основе кислотно-катализируемой реакции 1-(2,2-диметоксиэтил)мочевин **1** с С- и Р-нуклеофилами. Предложенный метод не требует жёстких условий и позволяет в широких пределах варьировать заместители в четвёртом положении гетероцикла.



*Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 21-73-20020).*

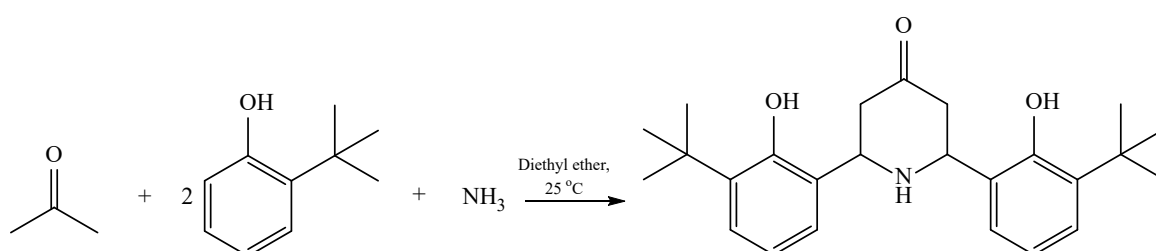
# СИНТЕЗ 2,6-БИС(2'-ГИДРОКСИ-3'-ТРЕТБУТИЛ)-ПИПЕРИДИН-4-ОНА

[Кузьмина А.А.](#), Асылханов Ж.С., Калугин С.Н., Цукерман М.В.

Казахский национальный университет им. аль-Фараби,  
г. Алматы, пр-т аль-Фараби 71, 050001,  
[akuzmina539@gmail.com](mailto:akuzmina539@gmail.com)

Производные пиперидина проявляют антибактериальную, противовирусную, анестезирующую и другие виды биологической активности и находят широкое применение как в медицине, так и в сельском хозяйстве<sup>1</sup>.

В связи с этим получение новых производных пиперидина представляет большой практический и теоретический интерес.



2,6-бис(2'-гидрокси-3'-третбутил)пиперидин-4-он синтезирован взаимодействием ацетона с 3-третбутилсалициловым альдегидом и аммиаком в среде диэтилового эфира при комнатной температуре в течении 12 часов. Выход 68%.

Структура полученного соединения доказана с помощью ЯМР-спектроскопии. Спектры ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C снимали в хлороформе-D на спектрометре JNM-ECA 400 (Jeol) с рабочими частотами 400 (1H), 100 МГц (13C).

<sup>1</sup>H ЯМР δ 11.78 (d, *J* = 2.2 Hz, 1H), 9.86 (d, *J* = 2.2 Hz, 1H), 7.52 (dt, *J* = 7.7, 1.9 Hz, 1H), 7.38 (dt, *J* = 7.7, 2.0 Hz, 1H), 6.93 (td, *J* = 7.7, 2.3 Hz, 1H), 1.41 (t, *J* = 2.0 Hz, 9H), 1.25 (s, 1H). <sup>13</sup>C ЯМР δ 197.27, 161.30, 138.30, 134.26, 134.17, 132.14, 132.03, 120.72, 119.35, 119.26, 100.01, 34.93, 29.31, 29.24.

## Литература

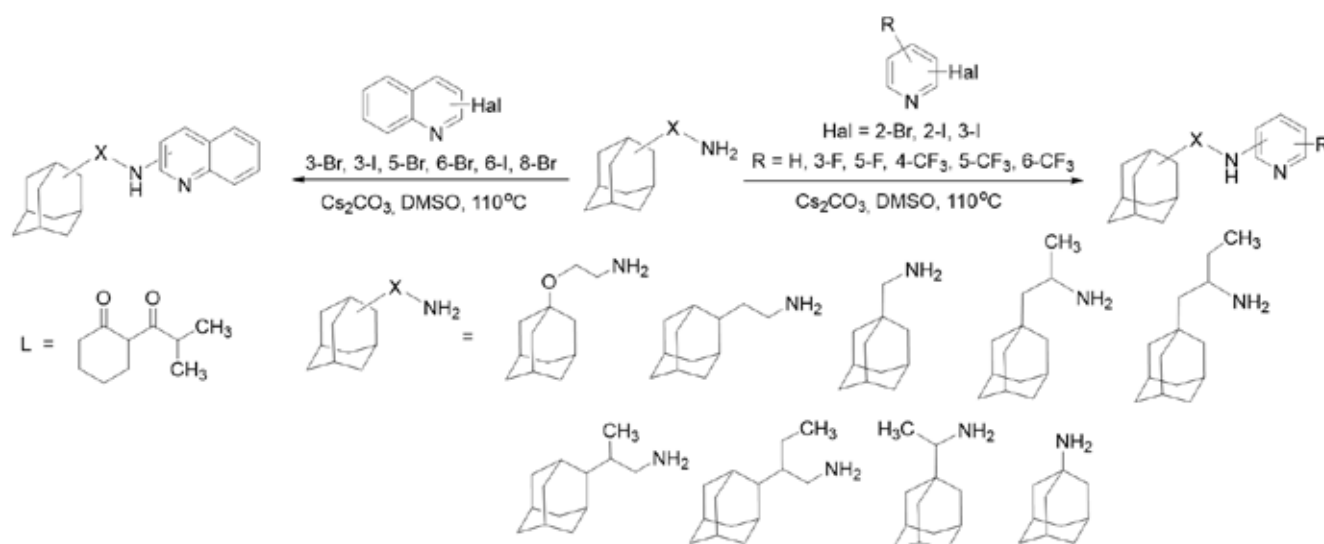
1. Калугин С.Н. Биологические поверхностно-активные соединения тетрагидропиранина и пиперидина. Алматы: Казак университети, 2020. – 176 с.

# CU(I)-КАТАЛИЗИРУЕМОЕ АМИНИРОВАНИЕ В СИНТЕЗЕ N-ПИРИДИНИЛ И N-ХИНОЛИНИЛЗАМЕЩЕННЫХ АДАМАНТАНСОДЕРЖАЩИХ АМИНОВ

[Кулюхина Д.С.](#), Аверин А.Д., Белецкая И.П.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
 Химический факультет, 119991, Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр.3,  
 e-mail: [kuliukhinadaria03@gmail.com](mailto:kuliukhinadaria03@gmail.com).

Катализируемое комплексами одновалентной меди аминирование разнообразных арил- и гетероарилгалогенидов во многих случаях служит удобной альтернативой реакции Бухвальда-Хартвига<sup>1</sup>. Основное внимание в наших работах уделяется разработке методов синтеза N-(гетеро)арилпроизводных адамантансодержащих аминов в связи с большим потенциалом их разнообразной биологической активности. Недавно проведено комплексное сравнение эффективности Pd(0)- и Cu(I)-катализируемого гетероарилрования таких аминов фторсодержащими бром- и иодпиридинами<sup>2,3</sup>. В настоящем исследовании показано, что использование в качестве растворителя ДМСО и каталитической системы CuI/2-изобутирилциклогексанон в большинстве случаев способствует увеличению выходов целевых продуктов гетероарилрования, продемонстрирована область применения данного синтетического метода, выявлены его определенные ограничения, проведено сравнение с Pd(0)-катализируемым гетероарилрованием.



## Литература

1. Averin A.D., Abel A.S., Grigorova O.K., Latyshev G.V., Kotovshchikov Y.N., Mitrofanov A.Y., Bessmertnykh-Lemeune A., Beletskaya I.P. *Pure Appl. Chem.* 2020, **92**, 1181.
2. Lyakhovich M.S., Murashkina A.V., Averin A.D., Abel A.S., Maloshitskaya O.A., Savelyev E.N., Orlinson B.S., Beletskaya I.P. *Russ. J. Org. Chem.*, 2019, **55**, 737.
3. Lyakhovich M.S., Murashkina A.V., Panchenko S.P., Averin A.D., Abel A.S., Maloshitskaya O.A., Savelyev E.N., Orlinson B.S., Novakov I.A., Beletskaya I.P. *Russ. J. Org. Chem.*, 2019, **55**, 768.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 17-03-00888.

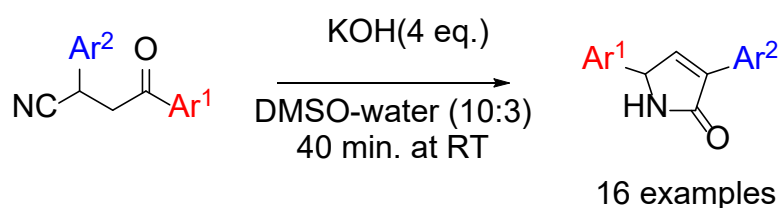
# ЦИКЛИЗАЦИЯ 4-(2-ГИДРОКСИ-4-МЕТИЛФЕНИЛ)-4-ОКСО-2-ФЕНИЛБУТАНИТРИЛА В ПРИСУТСТВИИ ЩЕЛОЧИ

[Куренков И.А.](#), Аксенов Н.А., Аксенов А.В., Аксенова Д.С.

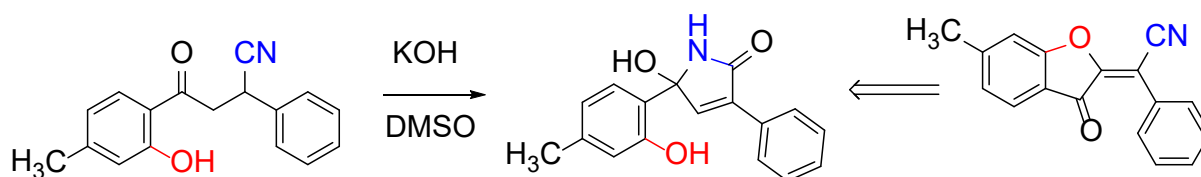
Северо-Кавказский федеральный университет, 355017, Ставрополь, ул. Пушкина, 1  
E-mail: kurenkman@icloud.com

Продукты циклизации производных халконов давно привлекают исследователей всего мира. Это связано с доступностью их предшественников, широкому спектру заместителей ароматического кольца, а также большому количеству видов биологической активности.

Ранее нами была изучена реакция циклизации 3-цианокетонов в присутствии щелочи с образованием 1,3-диарилзамещенных 5-гидрокси-1,5-дигидро-2H-пиррол-2-онов<sup>1</sup>:



Нами также была предпринята попытка синтеза (Z)-2-(6-метил-3-оксобензофуран-2(3H)-илиден)-2-фенилацетонитрила путем циклизации 4-(2-гидрокси-4-метилфенил)-4-оксо-2-фенилбутанитрила в присутствии щелочи.



Низкая стабильность полученного соединения привела к циклизации с окислением по механизму, описанному ранее нашим коллективом<sup>1</sup> с получением 5-гидрокси-5-(2-гидрокси-4-метилфенил)-3-фенил-1,5-дигидро-2H-пиррол-2-она.

Реакция была изучена на о-гидроксизамещенных халконах. Далее будет изучена возможность рециклизации полученных соединений в фуран.

## Литература

1. N.A. Aksenov, D.A. Aksenov, I.A. Kurenkov, A.V. Aksenov, A.A. Skomorokhov, L.A. Prityko, M. Rubin, *RSC Adv.*, **2021**, 11, 16236

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-73-10029).

## ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ ФТОРИРОВАННЫХ ДИПИРРОМЕТАНОВ И BODIPY

**Ларкович Р.В., Шамбалова В.Э., Алдошин А.С., Ненайденко В.Г.**

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
119991, Москва, Ленинские горы 1с3,  
e-mail: roma\_virtual@mail.ru*

Фторорганические соединения играют ключевую роль в разработке новых лекарств и материалов. Введение фтора в целевую молекулу может положительно влиять на ее фармакокинетические и физико-химические свойства.<sup>1</sup> Люминесцентные соединения нашли широкое применение в различных областях химии, биомедицины, биологии и материаловедения.<sup>2</sup> Важной областью применения таких веществ является фотодинамическая терапия (ФДТ) рака,<sup>3</sup> а также флуоресцентная микроскопия.<sup>4</sup>

Данная работа посвящена разработке синтеза новых фторированных дипиррометанов **3** и люминесцентных красителей BODIPYs **4** на их основе.

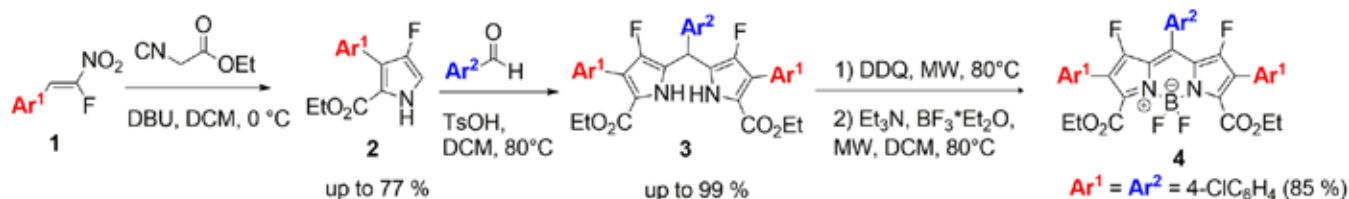


Схема 1. Получение новых фторированных пиррольных производных

Показано, что пирролы **2** могут быть эффективно превращены в дипиррометаны **3** при взаимодействии с альдегидами в присутствии каталитических количеств *p*-толуолсульфоновой кислоты (Схема 1). Последующие стадии окисления и образования борного комплекса приводят к образованию новых BODIPYs **4** с высокими выходами. Ожидается, что присутствие фтора в ядре пиррола окажет глубокое влияние на длины волн поглощения и испускания и на окислительно-восстановительные потенциалы основного и возбужденного состояний. Влияние фтора в  $\beta$ -положении может быть решающим для модуляции оптических свойств и обеспечения более высокой стабильности этих фторированных красителей и фотокатализаторов к окислению.

### Литература

1. Wang B.C., Wang L.J., Jiang B., Wang S.Y., Wu N., Li X.Q., Shi D.Y., *Mini Rev. Med. Chem.*, 2017, **17**, 683-692.
2. Cetindere S., *Am J Biomed Sci & Res.*, 2020, **7**(2)
3. Kamkaew A., Lim S.H., Lee H.B., Kiew L.V., Chung L.Y., Burgess K., *Chem. Soc. Rev.*, 2013, **42**, 77-88
4. Hassan M., Klaunberg B.A., *Comp Med.*, 2004, **54**, 635-644

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-33-70132.*

# ВЛИЯНИЕ ПОЛИПИРИДИНОВ НА ЦИТОТОКСИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАЗНОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЭНДОГЕННЫХ МЕТАЛЛОВ С ПРОИЗВОДНЫМИ ТЕТРАЗОЛА

**Лидер Е.В.,<sup>а</sup> Еремина Ю.А.,<sup>а,б</sup> Ермакова Е.А.,<sup>а,б</sup> Ключова Л.С.<sup>а,б</sup>**

<sup>а</sup> *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,  
630090, Новосибирск, пр-т Акад. Лаврентьева, 3  
e-mail: lisalider@ngs.ru*

<sup>б</sup> *Научно-исследовательский институт молекулярной биологии и биофизики –  
структурное подразделение ФИЦ ФТМ,  
630117, Новосибирск, ул. Тимакова, 2/12*

В настоящее время существует множество способов борьбы с раковыми заболеваниями, однако до сих пор наиболее эффективным методом для лечения большинства видов опухолей остается химиотерапия. Лекарства на основе платины (цисплатин и его аналоги) по-прежнему используются в терапии раковых заболеваний, но серьезные побочные эффекты и возникновение резистентности стимулируют поиск новых противоопухолевых соединений. В последние годы вектор исследований сместился в область комплексов на основе эндогенных металлов.

В рамках данной работы исследовано влияние ряда полипиридинов (2,2'-бипиридин (bipy), 1,10-фенантролин (phen), 4,4'-диметил-2,2'-бипиридин (dmbipy), 4,7-диметил-1,10-фенантролин (dmphen)) на цитотоксические свойства разнолигандных комплексов меди(II), кобальта(II) и марганца(II) с производными тетразола (5-фенил-1Н-тетразол (ФТ), 5-метил-1Н-тетразол (МТ), 5-бензил-1Н-тетразол (БТ)) в качестве второго лиганда. В свою очередь интерес к таким объектам вызван благодаря их схожему строению с комплексами меди(II) класса Casiopeinas, которые показали свою эффективность и проходят стадию доклинических испытаний.

Влияние лигандов и комплексов на жизнеспособность клеток оценивали на клеточных линиях Hep2 (карцинома гортани человека), MCF-7 (аденокарцинома молочной железы) и HepG2 (гепатокарцинома) с помощью прибора IN Cell Analyzer 2200. Показано, что цитотоксические свойства наиболее выражены у комплексов меди(II), при этом токсичность сильно зависит от полипиридинового лиганда и усиливается при переходе от бипиридина к фенантролину: bipy < dmbipy < phen < dmphen.

Полученные данные для 2D моделей были сопоставлены с результатами оценки цитотоксической активности на 3D культурах (клетки HepG2) для наиболее эффективных соединений. Показано, что комплекс  $[Cu_2(phen)_2(ФТ)_4]$  одинаково эффективен как на 2D, так и на 3D клеточных моделях ( $IC_{50} = 2,5$  мкМ), а комплекс  $[Cu_2(bipy)_2(ФТ)_4]$  менее токсичен в случае 3D клеточных культур ( $IC_{50} = 21,7$  мкМ для 2D культур и  $IC_{50} \sim 60$  мкМ для сфероидов).

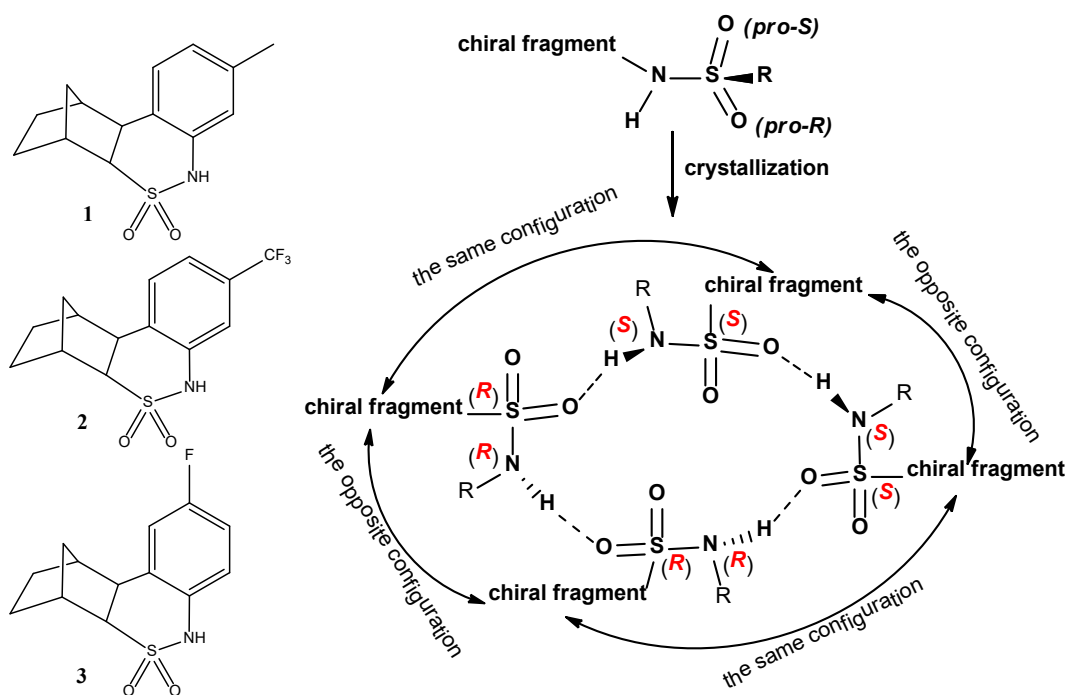
*Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 20-73-10207).*

# ОТ КЛАССИЧЕСКОЙ К СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ СТЕРЕОХИМИИ: ДВОЙНАЯ ИНДУЦИРОВАННАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЕЙ ДИАСТЕРЕОМЕРИЗАЦИЯ ЦИКЛИЧЕСКОГО СУЛЬФОАМИДА

Лодочникова О.А.

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,  
420088, Казань, улица ак. Арбузова 8,  
e-mail: lod\_olga@mail.ru

Обсуждается взаимосвязь конфигурационной лабильности атомов азота и серы в составе  $-N(H)-SO_2-$  группировки в ряду циклических сульфонамидов **1-3**. Выявлена способность соединений указанной серии кристаллизоваться в виде различных диастереомеров по атому азота, при этом относительная конфигурация атома азота определяет относительную супрамолекулярную конфигурацию вновь сформированного хирального атома серы. Представлена стереохимическая трансформация, названная нами «двойной индуцированной кристаллизацией диастереомеризацией»<sup>1</sup>:



## Литература

1. Lodochnikova O.A., Gerasimova D.P., Plemenkov V.V., *Chirality*, 2021, **33**, 409.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 17-13-01209.

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГЕТАРЕНО[Е]ПИРРОЛ-2,3-ДИОНОВ С ТИОЛАМИ: ДИВЕРГЕНТНЫЙ ПОДХОД К ДВУМ РАЗЛИЧНЫМ 5-ТИОЗАМЕЩЕННЫМ ПРОИЗВОДНЫМ ПИРРОЛ-2-ОНА

Лукманова Д.Н., Дмитриев М.В., Машевская И.В.

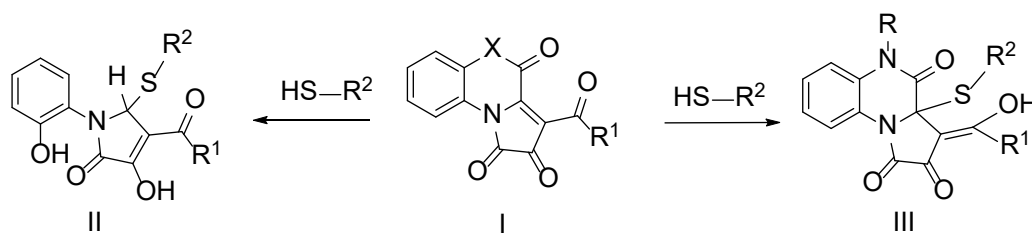
Пермский государственный национальный исследовательский университет,  
614990, Пермь, Букирева 15,  
e-mail: lukmanova.96@mail.ru

Недавно было обнаружено, что 3-гидрокси-1,5-дигидро-2*H*-пиррол-2-оны являются ценными антибактериальными остовами, в том числе против метициллин-резистентного *Staphylococcus aureus*<sup>1</sup>. Данные каркасы были разработаны путем оптимизации структуры соединений, выделенных из морских природных продуктов: фенопиррозина<sup>2</sup> и *n*-гидроксифенопиррозина<sup>3</sup>. Как и следовало ожидать, противомикробная активность таких соединений напрямую зависит от природы заместителей.

Тщательный анализ возможных заместителей, которые, как сообщалось, были встроены в 3-гидрокси-1,5-дигидро-2*H*-пиррол-2-оны, показал, что их 5-тиозамещенные производные мало описаны в литературе.

В результате данной работы был осуществлен синтез потенциально биологически активных 3-гидрокси-1,5-дигидро-2*H*-пиррол-2-онов, несущих конформационно свободные тиозаместители при C<sup>5</sup> (Схема 1).

Схема 1. Взаимодействие гетарено[е]пиррол-2,3-дионов с меркаптанами.



I: X=N, O

II: R=H, Me, Ph, Bn; R<sup>1</sup>=Ar, HetAr; R<sup>2</sup>=Et, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH, Cy, Ph, Bn; R<sup>4</sup>=Ph, 4-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>CH<sub>3</sub>, 4-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>Cl, 4-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NO<sub>2</sub>, 4-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>OEt.

## Литература

- Cusumano A.Q., Pierce J.G. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 2018, **28**, 2732–2735.
- Shiomi K., Yang H., Xu Q., Arai N., Namiki M., Hayashi M., Inokoshi J., Takeshima H., Masuma P., Komiyama K., Omura S. *J. of Antibiotics*, 1995, **48**, 1413–1418.
- Park Y.C., Gunasekera S.P., Lopez J.V., McCarthy P.J., Wright A.E., *J. Nat. Prod.*, 2006, **69**, 580–584.

Работа выполнена при финансовой поддержке научной школы Пермского края «Биологически активные гетероциклы (кафедра органической химии ПГНИУ)». № С-26/174.5



# НОВЫЙ ПОДХОД К ОПРЕДЕЛЕНИЮ КОНСТАНТ ПРОТОЛИТИЧЕСКИХ РАВНОВЕСИЙ ТЕТРАЗОЛОВ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЕЙ

[Лысова С.С.](#),<sup>a</sup> Салькова А.С.,<sup>a</sup> Зевацкий Ю.Э.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, 191186, Санкт-Петербург, ул. Большая Морская 18, e-mail: [lusovass@mail.ru](mailto:lusovass@mail.ru)

<sup>b</sup> АО «Новбытхим», 188300, ЛО, г. Гатчина, ул. Железнодорожная, 45

Ранее нами был предложен метод концентрационной УФ/вид спектrophотометрии для определения точных значений термодинамических констант диссоциации  $pK_a$  слабых органических кислот, оснований и амфолитов в водных и спиртовых средах<sup>1,2</sup>. По сравнению со стандартными методиками спектrophотометрического и потенциометрического рН-титрования, этот метод не требует измерений значений рН-среды и использования буферных растворов с постоянной ионной силой, что является существенной проблемой в неводных средах.

В настоящей работе мы расширили возможности данного подхода и применили его для определения значений  $pK_a$  тетразолов, которые являются гетероциклическими NH-кислотами средней силы. Выбор объектов связан с применением указанных соединений в разработке лекарственных препаратов. Известно, что исследование биологической активности подобных соединений невозможно без изучения их кислотно-основных свойств<sup>3,4</sup>.

Чувствительность и погрешность спектrophотометрического определения зависят от аналитической длины волны, при которой проводятся измерения. Традиционно аналитическую длину волны выбирают таким образом, чтобы она соответствовала наибольшей разности между оптическими плотностями растворов крайних прототропных форм, используя концентрированные растворы кислот и щелочей, что может сильно изменять свойства растворителя вследствие ионной ассоциации и сольватохромных эффектов. В настоящей работе мы предложили новый способ определения аналитических длин волн без использования концентрированных растворов сильных кислот и щелочей.

Относительная погрешность определения термодинамических констант диссоциации тетразолов в водных и спиртовых средах не превышает 5 % и согласуется с литературными данными.

## Литература

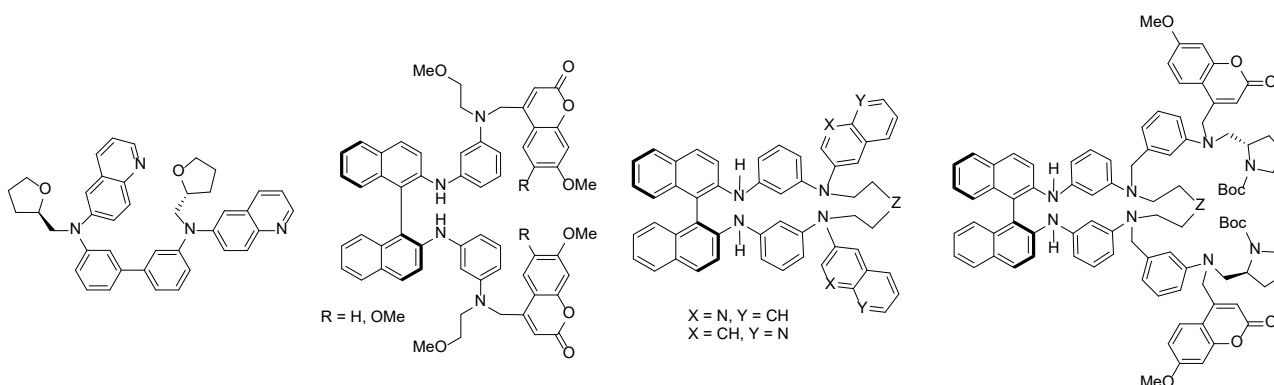
1. Lysova S.S., Skripnikova T.A., Zevatskii Yu.E. *Russian J. of Phys. Chem. A*, 2018, **92**, 922.
2. Lysova S.S., Skripnikova T.A., Zevatskii Yu.E. *Russian J. of Phys. Chem. A*, 2021, **95**, 1370.
3. Островский В.А., Трифионов Р.Е., Попова Е.А. *Изв. РАН, Сер. Хим.* 2012. **4**. 765.
4. Мызников Л.В., Ворона С.В., Артамонова Т.В., Зевацкий Ю.Э. *Изв. РАН. Сер. Хим.* 2016. **65**, 923.

# ХИНОЛИН- И КУМАРИН-СОДЕРЖАЩИЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ ХЕМОСЕНСОРЫ

[Малышева А.С.](#), Фоменко В.И., Григорова О.К., Аверин А.Д., Белецкая И.П.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,  
119991, Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр.3,  
e-mail: annette9513@yandex.ru

Введение в состав молекул потенциальных хемосенсоров таких структурных фрагментов как хинолин и кумарин позволяет улучшать их флуоресцентные свойства, а также расширяет способности соединений к образованию молекулярных комплексов за счет наличия в данных заместителях дополнительных координационных центров. В рамках нашего подхода к созданию энантиоселективных флуоресцентных детекторов оптически активные заместители вводятся в положения 4,6 или 3,5 хинолина, хиральные производные на основе бифенила<sup>1</sup>, нафталина<sup>2</sup> или 2,2'-диамино-1,1'-бинафтила (БИНАМа)<sup>3</sup> снабжаются дополнительными флуорофорными группами, такими как 3- и 6-аминохинолин, 7-метокси- и 6,7-диметоксикумарин, а также данные структурные фрагменты вводят в состав хиральных макроциклических соединений в качестве экзоциклических флуорофоров. Производные хинолина получают с помощью Pd(0)-катализируемого аминирования, кумариновые производные – с помощью стандартного нуклеофильного замещения. Изучение возможностей полученных соединений выступать в качестве энантиоселективных флуоресцентных детекторов осуществляется с использованием набора индивидуальных энантиомеров модельных аминокислот и эфиров аминокислот.



## Литература

1. A.V. Shaferov, A.S. Malysheva, A.D. Averin, O.K. Grigorova, A.K. Buryak, I.P. Beletskaya. *Russ. Chem. Bull.*, 2020, **69**, 1366.
2. A.S. Malysheva, A.V. Shaferov, A.D. Averin, O.K. Grigorova, O.A. Maloshitskaya, V.A. Roznyatovsky, I.P. Beletskaya. *Russ. Chem. Bull.*, 2020, **69**, 1355.
3. A.V. Shaferov, A.S. Malysheva, A.D. Averin, O.A. Maloshitskaya, I.P. Beletskaya. *Sensors*, 2020, **20**, 3234.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-03-00796.

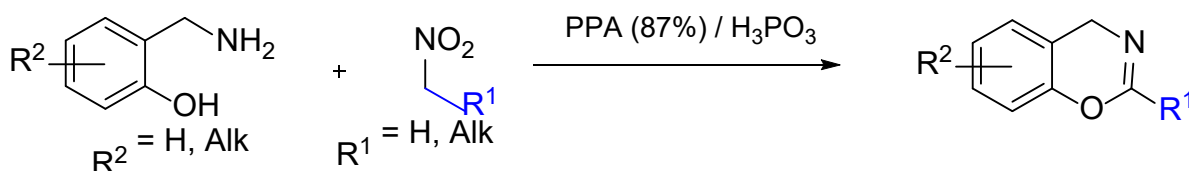
# НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА 2-АЛКИЛПРОИЗВОДНЫХ 4Н-БЕНЗО[Е][1,3]ОКСАЗИНОВ

**Малиуга В.В., Гришин И.Ю., Аксенов А.В., Аксенов Д.А., Аксенов Н.А.**

*Химико-Фармацевтический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет,  
355017, Россия, г. Ставрополь, ул. Пушкина, д. 1  
E-mail: aaksenov@ncfu.ru, vmaliuga@ncfu.ru*

В настоящее время 4Н-бензо[е][1,3]оксазины и их производные приобретают все большую ценность в связи с их перспективностью с позиции биоскрининга. Поэтому разработка новых эффективных методов синтеза соединений, содержащих бензоксазиновое ядро, является актуальной задачей.

Нами был разработан метод синтеза 2-алкилзамещенных 4Н-бензо[е][1,3]оксазинов из производных 2-(аминометил)фенолов и 1-нитроалканов, активированных смесью ПФК (87%) и фосфористой кислот. В ПФК нитроалканы образуют очень стабильную дважды фосфорилированную аци-форму, способную выступать в качестве электрофильного компонента во многих селективных процессах, которые протекают подобно реакции Нефа с участием С-нуклеофилов и N-нуклеофилов.



Показано, что в указанной среде фосфорилированная аци-форма нитроалканов, при наличии в о-положении бензиламина второй нуклеофильной ОН-группы, может быть успешно применена для построения бензоксазиновой системы путем внутримолекулярной циклоконденсации.

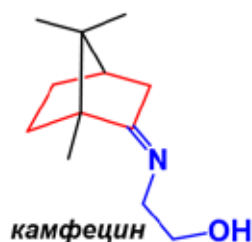
Данный способ расширяет препаративные возможности использования алифатических нитросоединений в синтезе биологически активных гетероциклов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №20-33-90027 аспиранты).*

# СПИРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ОКСАЗОЛИДИНЫ И 1,3-ДИОКСОЛАНЫ В СИНТЕЗЕ ПРОТИВОВИРУСНЫХ ПРЕПАРАТОВ

Мамедова С.Ф., Бекенов А.Г., Нуриев В.Н., Вацадзе С.З.

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,  
119991, Москва, Россия  
e-mail: [tamedova.s.f.96@gmail.com](mailto:tamedova.s.f.96@gmail.com)



Синтез аналогов камфецина, проявляющего противовирусные свойства, является актуальной задачей. Мы предлагаем рациональные и удобные методы получения таких аналогов, через получение и преобразование каркасных углеводородов, содержащих две карбонильные функции. Работа с дикарбонильными соединениями требует использования защитных групп.

В ходе перефункционализации или же введения в каркас второй карбонильной группы 1,3-диоксолановая защита остается более удобной защитой, так как способна выдерживать даже мультикомпонентные превращения в присутствии слабых кислот.

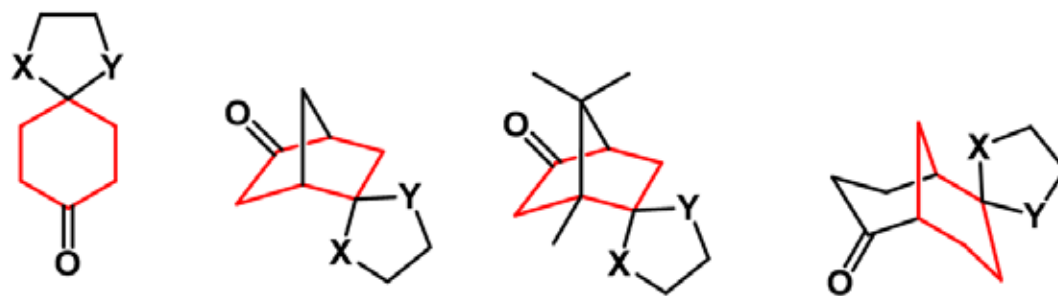


Рис. 1: Структуры исследуемых соединений в которых  $X, Y = O, N$ .

В тоже время обнаружено, что при введении в молекулу кетона иминоэтанольного фрагмента для ряда кетонов, содержащих шестичленное кольцо, образуются более термодинамически стабильные спироциклические оксазолидины, что позволяет использовать их как защитную группу, которую после череды превращений можно трансформировать обратно в фармакофорный остаток иминоспирта.

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 20-04-60215.

# РЕГИОДИВЕРГЕНТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПИРРОЛОБЕНЗОКСАЗЕПИНТРИОНОВ С АРИЛАМИНАМИ

Масливец А.А., Масливей А.Н.

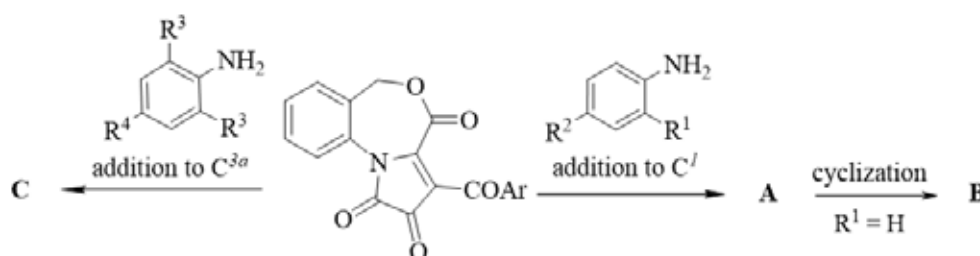
Пермский государственный национальный исследовательский университет,  
 614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15,  
 e-mail: koh2@psu.ru

Гетарено[е]пиррол-2,3-дионы (1*H*-пиррол-2,3-дионы, аннелированные по стороне [е] гетерофрагментом) являются легкодоступными, высокоактивными полиэлектрофильными субстратами, на основе которых синтезирован широкий спектр гетероциклических соединений, в том числе обладающих фармакологической активностью.

Регионаправленность взаимодействия гетарено[е]пиррол-2,3-дионов с нуклеофильными реагентами определяется многими факторами, в том числе структурой гетерофрагмента и структурой атакующей молекулы.

При взаимодействии 3-ароилпирроло[1,2-а][4,1]бензоксазепин-1,2,4-трионов с *o*-незамещенными и *o*-замещенными анилинами реализуются три различные схемы взаимодействия.

*орто*-Незамещенные и *орто*-монозамещенные анилины атакуют группой NH атом углерода в положении 1 пирролобензоксазепинового цикла с расщеплением связи C<sup>1</sup>-N<sup>11</sup> и образованием продуктов структуры А. В случае отсутствия *орто*-заместителей в анилине эти продукты подвергаются дальнейшей внутримолекулярной циклизации вследствие присоединения амидной группы NH к ароильной карбонильной группе с образованием соединений В. При наличии двух заместителей в двух *орто*-положениях анилина происходит первоначальное присоединение группы NH анилина к атому C<sup>3a</sup> с последующим «расширением» пятичленного цикла в шестичленный. Региодивергентность взаимодействия пирролобензоксазепинов с ариламинами подробнее будет рассмотрена в докладе.



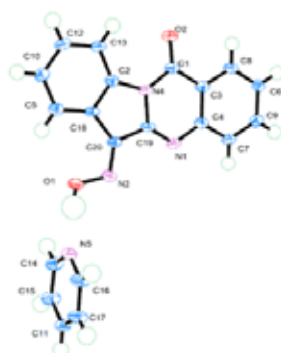
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ ( проект № 20-43-596008), Минобрнауки России (проект № FSNF-2020-0008) и Правительства Пермского края.

# ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ТРИПТАНТРИН-6-ОКСИМА И ЕГО СТРУКТУРНЫХ АНАЛОГОВ

Матвеевская В.В., Павлов Д.И., Потапов А.С.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН), пр-т Академика Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090, matveevskayavv@mail.ru*

Большое число жизненно важных биорегуляторов, являются продуктами вторичного метаболизма растений, грибов и микроорганизмов. Среди наиболее фармакологически активных групп вторичных метаболитов выделяют индольные и хиनाзолиновые алкалоиды, изопреноиды и тритерпеновые гликозиды. Самой распространенной и разнообразной по строению и фармакологическому действию является группа индольных алкалоидов. Алкалоид триптантрин относится к индольным производным хиназолина и на сегодняшний день считается одним из наиболее востребованных и фармакологически перспективных вторичных метаболитов класса алкалоидов, что обусловлено относительной простотой его синтеза и широким спектром биологической активности. В данной работе нами был получен оксим триптантрин, а также ряд его структурных аналогов. Для установления конфигурации оксимной группы нами были выполнены квантово-химические расчеты. Детальное установление структуры некоторых соединений было проведено с помощью рентгено-структурного анализа.



Результаты РСА и расчетные данные позволяют заключить, что полученные оксимы, исходя из пространственного расположения оксимной группы, относятся к *E*-изомерам. Для полученных оксимов была показана ингибирующая активность в отношении ферментов семейства JNK.

## ПРОИЗВОДНЫЕ АЛКАЛОИДА МЕРИДИАНИНА – НОВЫЙ КЛАСС АНТИБИОТИКОВ

Мендограло Е.Ю., Насибуллина Е.Р., Щербаков Р.О., Учускин М.Г.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,  
614068, Пермь, Букирева 15,  
e-mail: zelina.e@psu.ru*

На сегодняшний день ведущими проблемами для науки и человечества в целом остаются инфекционные заболевания, несмотря на появление разнообразных антибиотиков, открывших эру эффективного лечения бактериальных инфекций, по-прежнему во всем мире сохраняется высокая заболеваемость и смертность, от инфекций, вызываемых бактериями. Актуальной задачей является поиск и разработка методов синтеза новых высокоэффективных антимикробных средств. Известно, что меридианины – группа индольных алкалоидов, выделенных из морских беспозвоночных, обладают противотуберкулезной, антималярийной, цитотоксической и противоопухолевой активностями<sup>1</sup>.

С целью поиска новых антибактериальных агентов нами был синтезирован широкий ряд структурных аналогов меридианина в сравнительно простых реакционных условиях, при использовании легкодоступных исходных субстратов (рисунок 1). Исследована биологическая активность синтезированных соединений.

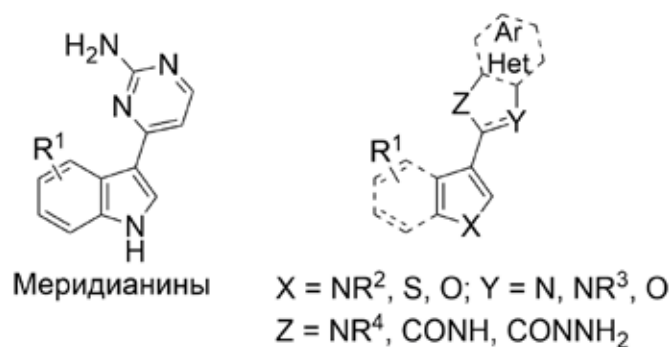


Рисунок 1

В докладе представлены возможные пути к синтезу целевых продуктов, рассмотрены особенности протекания ключевых превращений, показаны результаты исследований биологической активности синтезированных соединений.

### Литература

1. Yadav R.R., Khan S.I., Singh S., Khan I.A., Vishwakarma R.A., Bharate S.B. *Eur. J. Med. Chem.*, 2015, **98**, 160.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 0750-2020-0022.*

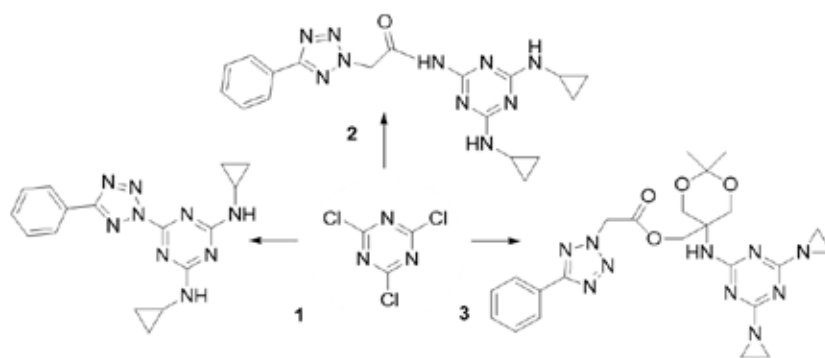
# СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,3,5-ТРИАЗИНА

**Миколайчук О.В.,<sup>a</sup> Протас А.В.,<sup>b</sup> Попова Е.А.,<sup>b</sup> Батыренко А.А.,<sup>a</sup>  
Малкова А.М.,<sup>a,b</sup> Шаройко В.В.,<sup>a,b</sup> Семенов К.Н.<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, 199034,  
Санкт-Петербург, Университетская наб. 7–9;  
e-mail: st801293@spbu.ru

<sup>b</sup> Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет  
им. акад. И.П. Павлова, 197022, Санкт-Петербург, ул. Льва Толстого 6-8

1,3,5-Триазининовый цикл является известным фармакофорным фрагментом, который широко используется при разработке высокоэффективных цитостатиков. Показано, что некоторые производные 1,3,5-триазина, например гексаметилмеламин (гексален), проявляют противоопухолевый эффект, обусловленный действием их метаболитов, мишенью для которых является молекула ДНК [1,2]. В связи с тем, что введение в 2-, 4- или 6-положения 1,3,5-триазининового ядра некоторых гетероциклических фрагментов может приводить к усилению противоопухолевой активности, в данной работе были синтезированы новые производные 1,3,5-триазина **1–3**, содержащие тетразолилные фрагменты. Методами УФ-спектрофотометрии, калориметрии и спектроскопии кругового дихроизма исследовано взаимодействие соединения **3** с ДНК. Определенная величина константы связывания  $K_b$  ( $4,08 \cdot 10^8 \text{ M}^{-1}$ ) свидетельствует о сильном взаимодействии соединения **3** с ДНК.



Соединение **3** проявляет выраженную дозозависимую цитотоксичность в отношении клеточных линий тератокарциномы яичника человека (РА-1) и эпителиальной карциномы человека (А-549), начиная с концентрации 50 мкМ. Методом МТТ теста были определены значения  $IC_{50}$  для РА-1–10,61 мкМ; для А-549–71,27 мкМ.

## Литература

1. Cascioferro S., Parrino B., Spanò V., Carbone A., Montalbano A., Barraja P., Diana P., Cirrincione G. *Eur J Med Chem*, 2017, **142**, 523.
2. Sandhirakasu V., Srinivasan P. Mannathusamy G. *Med Chem Res*, 2016, **25**, 1916.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (21-515-10007 КО\_а).



# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 2-АЛКЕНИЛФЕНОЛОВ С ПРОИЗВОДНЫМИ P(III), P(V) – НОВЫЙ ПУТЬ СИНТЕЗА ФОСФАКУМАРИНОВ

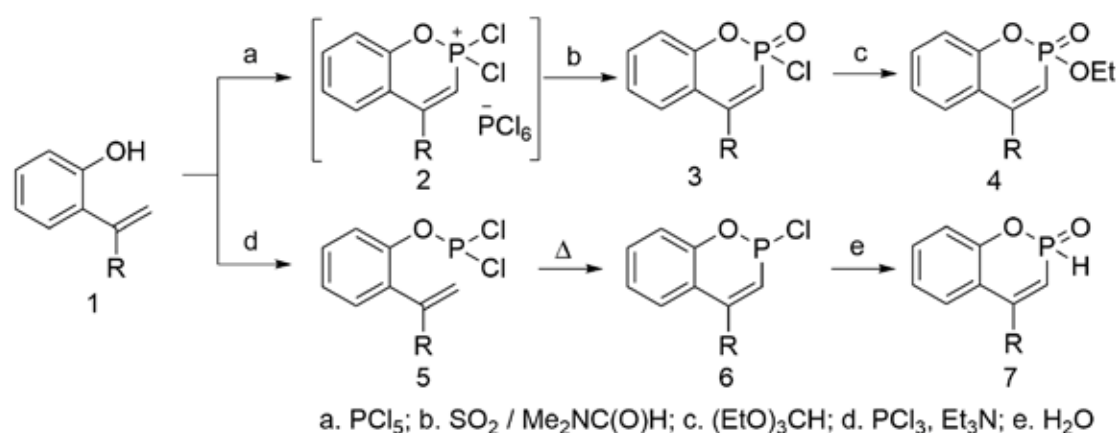
**Микуленкова Э.А.,<sup>а</sup> Татаринов Д.А.,<sup>а,б</sup> Миронов В.Ф.<sup>а,б</sup>**

<sup>а</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, 420008, Казань, ул. Кремлевская, 18  
 e-mail: elinamikulenkovagg@gmail.com

<sup>б</sup>ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, 420029, Казань, ул. Академика Арбузова, 8

Возрастающий интерес к разработке методов синтеза фосфакумаринов в последние десятилетия связан с открытием у данного класса соединений широкого спектра биологической активности, в первую очередь противоопухолевой, антирезорбтивной и антибактериальной<sup>1-2</sup>.

Нами было обнаружено, что взаимодействие 2-алкенилфенолов **1**<sup>3</sup> с пентахлоридом фосфора, после разложения комплексов **2** пропусканием диоксида серы и последующей обработкой ортоформиатом соединений **3** приводит к образованию фосфакумаринов **4**. При взаимодействии 2-алкенилфенолов **1**<sup>3</sup> с трихлоридом фосфора вначале образуется ариловый эфир **5**, дальнейшее нагревание которых приводит к циклизации и образованию хлорфосфоринов **6**, при гидролизе которых образуется фосфорин **7**. Следует отметить, что реакции трихлорида фосфора с неактивированными алкенами проходят лишь при катализе кислотами Льюиса<sup>4</sup>.



Очевидно, внутримолекулярная электрофильная атака дихлорфосфитной группы в орто-положении к двойной связи проходит гораздо легче, чем межмолекулярное взаимодействие хлорпроизводных P(III) с алкенами.

## Литература

1. Budzisz E., Krajewska U., Rozalski M. *Polym. J. Pharmacol*, 2004, **56** (4), 473–478.
2. Li X., Zhang D., Pang H., Shen F., Fu H., Jiang Y., Zhao Y. *Org. Lett*, 2005, **7**, 4919.
3. Brady W. T., Giang, Y. F. *J. Org. Chem.*, 1985, **50**, 5177-5179.
4. Пудовик А.Н., Хайруллин В.К., *Успехи химии*, 1968, **37**, 745-777.

# ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНАЯ ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИЯ 2-АЛКОКСИБЕНЗАЛЬДОКСИМОВ, КАТАЛИЗИРУЕМАЯ СОЕДИНЕНИЕМ ПОЛИВАЛЕНТНОГО ИОДА (III)

[Миронова И.А.](#), Постников П.С., Юсубов М.С., Йошимура А.

*Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий,  
Томский политехнический университет, 634050, Томск, проспект Ленина 30,  
e-mail: iam6@tpu.ru*

Многие биологически активные вещества и природные соединения содержат гетероциклические фрагменты, и разработка методик синтеза гетероциклических соединений является важным для этих веществ. В литературе известны методы окислительного 1,3-диполярного циклоприсоединения альдоксимов с различными ненасыщенными соединениями с применением соединений гипервалентного иода (III) в качестве медиаторов, однако, среди имеющихся работ не было обнаружено подобных каталитических внутримолекулярных циклизаций альдоксимов, которые приводили бы к образованию конденсированных гетероциклических производных. Так, нами разработана методика синтеза конденсированных гетероциклических соединений с использованием каталитических количеств соединений иода (III), которые генерируются *in situ* (рисунок 1):

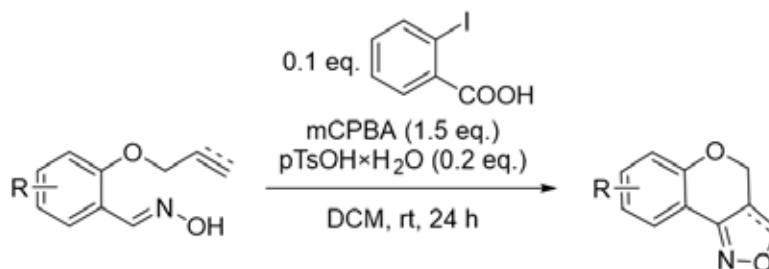


Рисунок 1. Внутримолекулярная каталитическая гетероциклизация 2-алкоксибензальдоксимов с использованием соединений иода (III)

Альдоксимины как с электроно-донорными, так и с электроно-акцепторными заместителями, содержащими терминальную ацетиленовую группу давали соответствующие бензопираноизоксазолы с выходами от хороших до высоких. Разработанная методика также применима для альдоксимов, содержащих 2-аллилокси-группу, которая приводила к образованию желаемых бензопираноизоксазолинов с хорошими выходами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты 21-73-20031 и 16-13-10081-Р.

# АНИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ГЕКСААЗАТРИФЕНИЛЕНА: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

[Михайленко М.В.](#),<sup>a</sup> Конарев Д.В.,<sup>a</sup> Хасанов С.С.,<sup>b</sup> Батов М.С.,<sup>a</sup> Шестаков А.Ф.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Институт проблем химической физики Российской Академии Наук,  
142432, Черноголовка, e-mail: mikhailenkov1@gmail.com*

<sup>b</sup>*Институт Физики Твердого Тела Российской Академии Наук, 142432, Черноголовка*

Гексаазатринафтилен (НАТНА) и гексаазатрифениленгексакарбонитрил  $\{\text{НАТ}(\text{CN})_6\}$  принадлежат к классу производных гексаазатрифенилена (НАТ). Соединения этого класса представляют значительный интерес с точки зрения дизайна функциональных материалов с перспективными проводящими и магнитными свойствами.

Нами впервые получены монокристаллы солей, содержащих анион-радикалы  $\{\text{НАТ}(\text{CN})_6\}^{\cdot-}$ . Показано, что  $\text{НАТ}(\text{CN})_6$  можно восстановить до анион-радикала солью фуллерена  $\{\text{криптанд}[2.2.2](\text{Na}^+)\}(\text{C}_{60}^{\cdot-})$ , графитом калия в присутствии криптанда, а также эрбием и диспрозием в присутствии красителя кристаллического фиолетового (CVCl). При этом образуются плотноупакованные стопки с разной степенью димеризации  $\text{НАТ}(\text{CN})_6^{\cdot-}$ . В таких стопках реализуются сильные магнитные взаимодействия между  $\text{НАТ}(\text{CN})_6^{\cdot-}$  с обменной энергией  $J/k_B$  до  $-80$  К. Получены так же стопки с чередующимися ионами  $\text{НАТ}(\text{CN})_6^{\cdot-}$  и  $\text{CV}^+$ .

При взаимодействии НАТНА с порошковым железом или карбонилем железа в присутствии соли CVCl получены в виде кристаллов анионные координационные соединения состава  $(\text{CV}^+)_2\{\text{НАТНА}(\text{Fe}^{\text{II}}\text{Cl}_2)_3\}^{2-}$ . Данный комплекс является первым соединением, содержащим дианионы НАТНА<sup>2-</sup> и треугольники из высокоспинового железа ( $S = 2$ ). Обнаружен сильный антиферромагнитный обмен между  $\text{Fe}^{\text{II}}$  через дианион НАТНА<sup>2-</sup> с температурой Вейса  $-98$  К. Согласно расчетам величина обменного взаимодействия  $J$  составляет  $-4.6$  см<sup>-1</sup>. По сравнению с нейтральным НАТНА обменное взаимодействие между тремя атомами  $\text{Fe}^{\text{II}}$  увеличивается более, чем в два раза, что объясняется уменьшением длины связи N-Fe при координации дианиона.

## Литература

1. Konarev D.V., Kuzmin A.V., Mikhailenko M.V., Khasanov S.S., Otsuka A., Yamochi H., Kitagawa H., Lyubovskaya R. N., *Chem. Eur. J.*, 2020, 26, 17470-17480.
2. Konarev D.V., Khasanov S.S., Mikhailenko M.V., Batov M.S., Otsuka A., Yamochi H., Kitagawa H., Lyubovskaya R.N., *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2021, N.1, 86-92.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, проект № 20-53-50001.*

# РЕАКЦИИ 1Н-ПИРРОЛ-2,3-ДИОНОВ С 1,3- И 1,4-ДИПОЛЯМИ

**Мороз А.А., Дмитриев М.В., Масливец А.Н.**

Пермский государственный национальный исследовательский университет,  
614068, Россия, г. Пермь, ул. Букирева, 15,  
e-mail: koh2@psu.ru

В современном органическом синтезе приоритет отдается простым в применении и наименее энергозатратным реакциям, которые дают возможность существенно увеличить молекулярную сложность соединений за минимальное количество шагов. Примерами таких реакций являются реакции дипольного циклоприсоединения. Так, 1,3- и 1,4-дипольное циклоприсоединение относится к одним из наиболее привлекательных методов для формирования фармакологически важных пяти- и шестичленных<sup>2</sup> азотсодержащих гетероциклов.

Часто в качестве дипольрофилов в таких реакциях используют карбонильные соединения. К ним относятся 1Н-пиррол-2,3-дионы. Наличие нескольких реакционных центров дает 1Н-пиррол-2,3-дионам возможность вступать в реакции циклоприсоединения с различными 1,3- и 1,4-диполями. Это позволяет синтезировать уникальные гетероциклические каркасы.

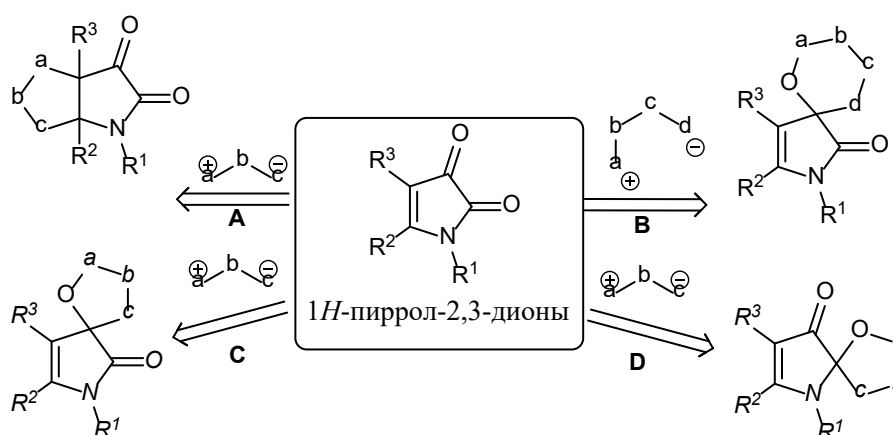


Рисунок 1.

При взаимодействии 1Н-пиррол-2,3-дионов с диполями различного типа обнаружено 4 направления протекания реакций (рис. 1), которые подробнее будут рассмотрены в докладе.

## Литература

1. Padwa A., Bur S. *Advances in Heterocyclic Chemistry*, 2016, **119**, 241
2. Nair V., Deepthi A., Ashok D., Raveendran A.E., Paul R.R. *Tetrahedron*, 2014, **19**, 3085.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 19-13-00290)

# ВОССТАНОВЛЕННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНАТОВ МЕТАЛЛОВ (Cu(II), Fe(II), Ni(II))

Назаров Д.И., <sup>a</sup> Хасанов С.С., <sup>b</sup> Кузьмин А.В., <sup>b</sup> Конарев Д.В. <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Институт Проблем Химической Физики РАН, Черноголовка, Россия.*

<sup>b</sup> *Институт Физики Твердого Тела, Черноголовка, Россия*

Комплексы порфиринов имеют важное значение для жизни на Земле. Благодаря уникальной электронной структуре они используются в качестве красителей, катализаторов и перспективных материалов для электроники и солнечных элементов. Окисление или восстановление порфиринов может влиять на их магнитные, оптические и проводящие свойства вследствие появления неспаренных электронов на макроциклах. Эти электроны могут участвовать в магнитном взаимодействии спинов или в высокой проводимости. Окисленные металлопорфирины изучаются давно. Изучение восстановления металлопорфиринов затруднено из-за их чувствительности к воздуху и высоким потенциалов восстановления ( $E_{\text{red}} < -1.2 \text{ В}$ ).

Нами разработаны методы восстановления порфиринов и получены анионные соединения в виде монокристаллов. Это позволило установить их кристаллические структуры, а так же исследовать магнитные и оптические свойства.

Восстановление тетрафенилпорфиринатов меди (II) и никеля (II) антраценидом цезия  $\{\text{Cs}^+(\text{Антрацен}^-)\}$  проводили в толуоле в присутствии криптанда. Получена кристаллическая соль  $\{\text{криптанд}(\text{Cs}^+)\}_2 \{\text{Cu}^{\text{II}}(\text{TRP}^{4-})\}^{2-}$  (**1**). Двухэлектронное восстановление  $\{\text{Cu}^{\text{II}}(\text{TRP}^{2-})\}^0$  происходит по макроциклу, что впервые позволило изучить структуру и свойства диамагнитных тетраанионов  $\text{TRP}^{4-}$  в твердом состоянии.

Восстановление тетрафенилпорфиринатов никеля(II) и железа(II) с использованием  $\text{Cs}^+(\text{Антрацен}^-)$  в присутствии криптанда или катиона  $\text{Bu}_3\text{MeP}^+$  сопровождается восстановлением центральных атомов металлов с образованием солей  $\{\text{криптанд}(\text{Cs}^+)\} \{\text{Ni}^{\text{I}}(\text{TRP}^{2-})\}^- \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$  (**2**),  $(\text{Bu}_3\text{MeP}^+) \{\text{Ni}^{\text{I}}(\text{TRP}^{2-})\}^- \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$  (**3**) и  $(\text{Bu}_3\text{MeP}^+) \{\text{Fe}^{\text{I}}(\text{TRP}^{2-})\}^- \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$  (**4**). Для соединений с  $\{\text{Ni}^{\text{I}}(\text{TRP}^{2-})\}^-$  установлена возможность переноса заряда с металла на дианионный макроцикл и образованием анионов  $\{\text{Ni}^{\text{II}}(\text{TRP}^{3-})\}^-$  с высокоспиновым  $\text{Ni}^{\text{II}}$  ( $S=1$ ) и трианион-радикалами  $\text{TRP}^{3-}$ . Заселение этого возбужденного состояния приводит к увеличению магнитного момента соли **2** с щелью между синглетным и кватерным уровнями 750 К.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (№ 17-13-01215П).*

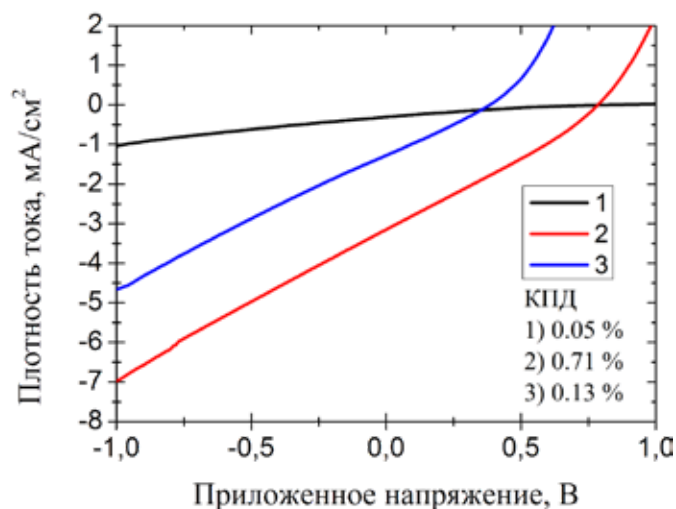
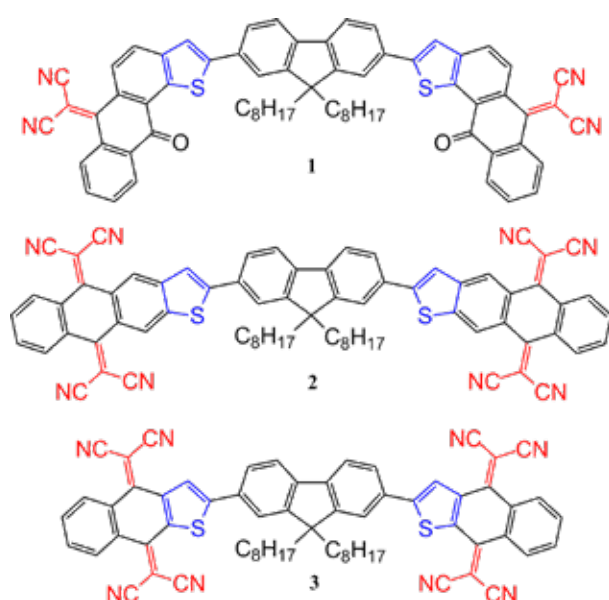
# ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НОВЫХ НЕФУЛЛЕРЕНОВЫХ АКЦЕПТОРОВ НА ОСНОВЕ АНТРА- И НАФТОТИОФЕНОВ

Невоструев Д.А.,<sup>а,б</sup> Баранов Д.С.,<sup>а</sup> Кобелева Е.С.,<sup>а</sup> Уваров М.Н.,<sup>а</sup> Попов А.А.,<sup>а,б</sup> Кулик Л.В.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Институт Химической Кинетики и Горения им. В. В. Воеводского  
Сибирского Отделения Российской Академии Наук, 630090, Новосибирск, Институтская 3,  
e-mail: nevostruev@kinetics.nsc.ru

<sup>б</sup>Новосибирский Государственный Университет, 630090, Новосибирск, Пирогова 1

Поиск новых акцепторных материалов является перспективным направлением органической фотовольтаики. В данной работе были получены оригинальные акцепторные соединения на основе антра- и нафтотиофенов, отличающиеся друг от друга структурой тиофенсодержащего фрагмента<sup>1-3</sup>.



Для проверки применимости полученных материалов в качестве новых акцепторов электрона были изготовлены фотовольтаические устройства. Оказалось, что максимальное значение производительности, равное 0.71 %, наблюдалось для структуры с антра[2,3-*b*]тиофендималонитрильным фрагментом.

## Литература

1. Baranov D. S., Uvarov M. N., Kazantsev M. S., Glebov E. M., Nevostruev D. A., Mostovich E. A., Antonova O. V., Kulik L. V. *European Journal of Organic Chemistry*, 2018, **19**, 2259.
2. Nevostruev D. A., Baranov D. S., Zinoviev V. A., Sukhikh A. S., Kulik L. V., *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2020, **94**, 1936.
3. Baranov D. S., Krivenko O. L., Kazantsev M. S., Nevostruev D. A., Kobleva E. S., Zinoviev V. A., Dmitriev A. A., Gritsan N. P., Kulik L. V. *Synthetic Metals*, 2019, **255**, 116097.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов 20-33-70126, 19-03-00149.

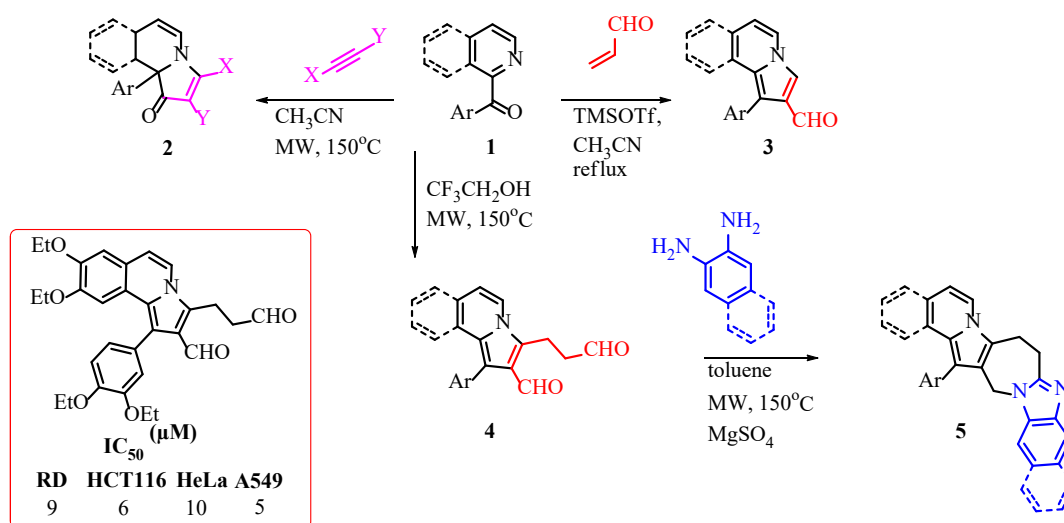
# СИНТЕЗ И ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ НОВЫХ 1-АРИЛИНДОЛИЗИНОВ И 1-АРИЛПИРРОЛО[2,1-А] ИЗОХИНОЛИНОВ

**Невская А.А.**<sup>1</sup>, Борисова Т.Н.<sup>1</sup>, Мифтяхова А.Р.<sup>1</sup>, Варламов А.В.<sup>1</sup>,  
Воскресенский Л.Г.<sup>1</sup>, Нгуен Ван Туен<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Российский университет дружбы народов (RUDN University),  
117198, Россия, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6,

<sup>2</sup>Институт Химии, ВАНТ,  
218 Хоанг Куок Вьет, Кау Зьау, Ханой, Вьетнам,  
e-mail: nevskaya\_aa@pfur.ru

Разработка подходов к синтезу производных индолизинов и пирроло[2,1-а]изохинолинов является одной из актуальных задач современной органической химии. В ходе недавнего исследования было показано, что упрощенные трициклические аналоги *Lamellarin D*, лишенные лактоного цикла, сохраняют цитотоксическую активность, причем производные с ароматическим пирролоизохинолиновым фрагментом проявили большую активность, чем соответствующие восстановленные аналоги<sup>1</sup>. Нами было показано, что индолизины и пирролоизохинолины могут быть получены путем трансформации 2-арилпиридинов и изохинолинов **1** с участием акролеина и алкинов, имеющих сложноэфирные и кетонные группы. Для изучения реакционной способности индолизинов и пирролоизохинолинов **4**, содержащих две альдегидные группы, были проведены реакции с о-фенилендиамином и нафталиндиамином-2,3, что позволило получить поликонденсированные соединения **5**.



Проведен первичный биоскрининг ряда полученных соединений на наличие цитотоксической активности на четырех линиях опухолевых клеток: A549 (карцинома легкого), HCT116 (карцинома кишечника), RD (рабдомиосаркома) и HeLa (аденокарцинома шейки матки). При исследовании взаимосвязей структура - активность в рамках изученных групп соединений можно прийти к заключению, что для проявления цитотоксичности в ряду полученных индолизинов и пирролоизохинолинов ключевое значение имеет наличие и количество альдегидных групп и в меньшей степени наличие плоского скелетона.

## Литература

Pla, D., Marchal, A., Olsen, C. A., Francesch, A., Cuevas, C., Albericio, F., & Álvarez, M. (2006). Synthesis and structure-activity relationship study of potent cytotoxic analogues of the marine alkaloid lamellarin D. *Journal of medicinal chemistry*, 49(11), 3257-3268.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (№ 21-53-54002) и Вьетнамской академией наук и технологий в рамках научного проекта (№ QTRU01.05/21-22).



# НИЗКОСИММЕТРИЧНЫЕ СУБФТАЛОЦИАНИНЫ, СОДЕРЖАЩИЕ 7-ЧЛЕННЫЙ ДИАЗЕПИНОВЫЙ И 6-ЧЛЕННЫЙ ПИРАЗИНОВЫЙ ГЕТЕРОЦИКЛЫ

[Никитин И.А.](#),<sup>a</sup> Скворцов И.А.,<sup>a</sup> Лазовский Д.А.,<sup>a</sup> Киракосян Г.А.,<sup>b</sup> Стужин П.А.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ивановский Государственный Химико-Технологический Университет,  
НИИ химии Макрогетероциклических соединений,  
153000, Иваново, Шереметевский проспект 7;  
E-mail: [ivan.nikitin-15@yandex.ru](mailto:ivan.nikitin-15@yandex.ru)

<sup>b</sup> Институт Физической Химии и Электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук,  
119071, Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4

Субфталоцианины (SubPc) - куполообразные макрогетероциклы, в которых три изоиндольных фрагмента выстроены вокруг атома бора, связанного через аксиальную связь с каким-либо лигандом<sup>1</sup>. Из-за своей структурной особенности, наличия и возможности замены аксиального лиганда и бензольных колец на периферии появляется возможность настраивать свойства данных соединений для их использования в качестве материалов для нелинейной оптики, OLED-устройств, молекулярных систем переноса энергии и в качестве структурных элементов супрамолекулярной химии<sup>2</sup>.

Нами путем смешанной циклотримеризации были получены субфталоцианины бора переменного состава, содержащие в своём составе 7-членный diazepиновый и 6-членный пиразиновый гетероциклы.

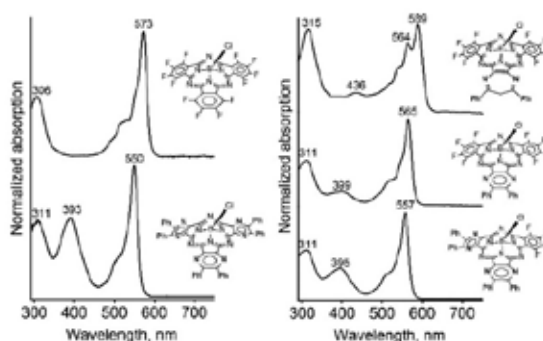


Рисунок 1. Структурное строение (низко)симметричных субфталоцианинов; электронные спектры поглощения.

Строение макроциклов было установлено на основании масс-спектрометрии MALDI-TOF и ЯМР спектроскопии. Более детальный анализ сравнительных характеристик соединений будет представлен в докладе.

## Литература

1. Claessens C.G., et al. *Chem. Rev.* **2014**, 114, 2192.
2. Gotfredsen H., et al. *Chemistry-A European Journal.* **2017**.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-33-90276.



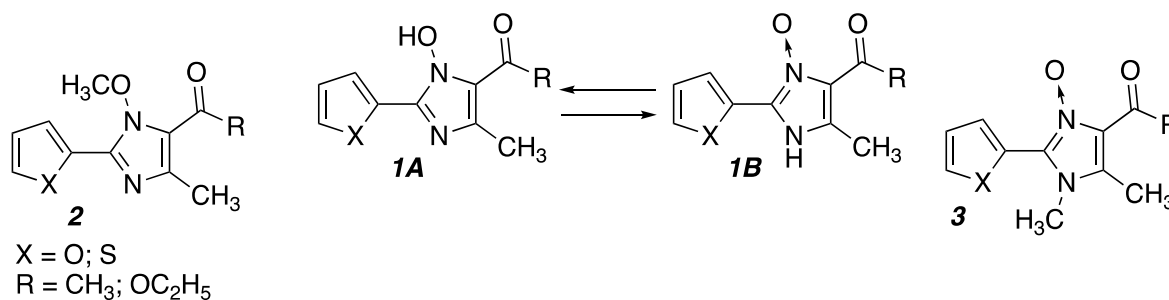
# ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТОТРОПНОЙ ТАУТОМЕРИИ 1-ГИДРОКСИ-2-(2-ТИЕНИЛ)- И 1-ГИДРОКСИ-2-(2-ФУРИЛ) ИМИДАЗОЛОВ МЕТОДОМ УФ-СПЕКТРОСКОПИИ

**Никитина П.А.,<sup>а,б</sup> Колдаева Т.Ю.,<sup>а</sup> Перевалов В.П.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,  
125047, Москва, Миусская пл., 9

<sup>б</sup>Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук,  
119991, Москва, ул. Вавилова, 28  
e-mail: polinandrevna@yandex.ru

В продолжении нашего изучения прототропной таутомерии 2-гетарил-1-гидроксиимидазолов<sup>1,2</sup> были зарегистрированы в различных растворителях электронные спектры поглощения производных 2-(2-тиенил)- и 2-(2-фурил)имидазола **1-3**. При этом в качестве модельной структуры 1-гидроксиимидазола **1А** выступали 1-метоксиимидазолы **2**, а в качестве модели N-оксидной таутомерной формы **1В** использовались 3-оксиды 1-метилимидазола **3**.



Было установлено, что как в апротонных растворителях (хлороформ, диоксан, ацетонитрил), так и в спиртах (октанол, бутанол, этанол, метанол) исследуемые производные 1-гидроксиимидазола существуют преимущественно в N-гидроксиформе **1А**, тогда как при переходе к водным спиртам (EtOH:H<sub>2</sub>O = 1:1) наблюдается переход в N-оксидную таутомерную форму **1В** (Рисунок 1).

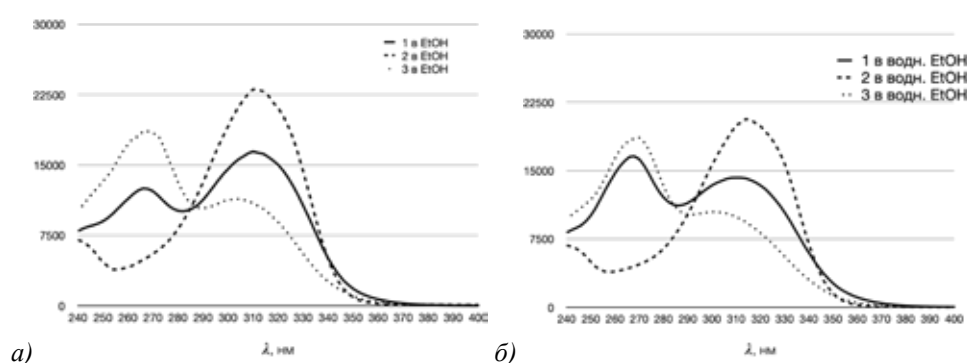


Рисунок 1. Электронные спектры поглощения 5-ацетил-4-метил-2-(2-фурил)имидазолов ( $R = \text{CH}_3$ ;  $X = \text{O}$ ) в этаноле (а) и водном этаноле (б).

## Литература

1. Nikitina P.A., Kuz'mina L.G., Perevalov V.P., Tkach I.I. *Tetrahedron*, 2013, **69**, 3249.
2. Nikitina P.A., Koldaeva T.Yu., Zakharko M.A., Perevalov V.P. *Aust. J. Chem.*, 2020, **73**, 1098.

# БИС(2-ХЛОРПРОПЕНИЛ)СЕЛЕНИД В РЕАКЦИЯХ ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИИ

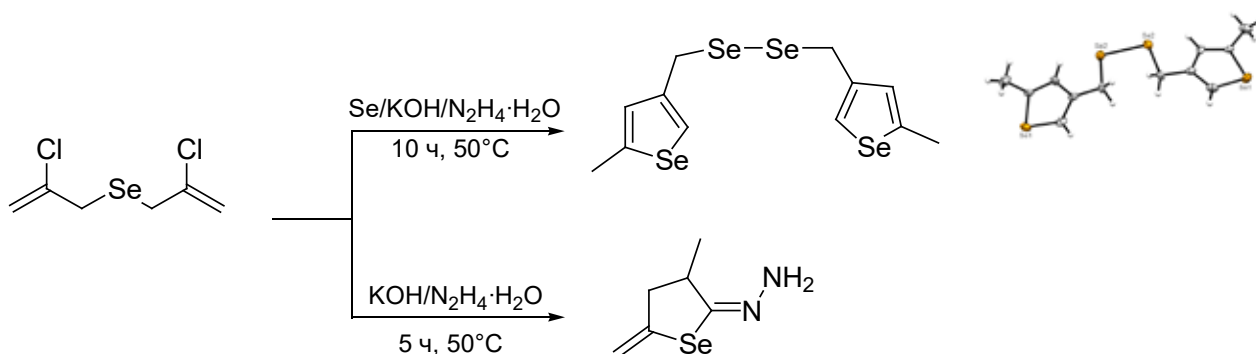
[Никонова В.С.](#), Мануйлов В.В., Корчевин Н.А., Розенцвейг И.Б.

Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской Академии Наук,  
664043, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1,  
e-mail: valentina\_serg@inbox.ru

Селен является одним из важнейших микроэлементов в процессах жизнедеятельности человека и других живых организмов<sup>1</sup>. Создание и развитие новых подходов к синтезу функциональных селенсодержащих соединений служит основой для получения доступных практически ценных веществ: катализаторов<sup>2</sup>, токопроводящих полимерных материалов<sup>3</sup> и лекарственных препаратов<sup>4</sup>.

Несмотря на высокий прикладной потенциал селенорганических соединений, современные подходы к их синтезу часто ограничиваются дороговизной реагентов или катализаторов, жёсткими условиями и низкой хемо-, регио-, или стереоселективностью реакций.

В данной работе разработан эффективный одnoreакторный метод синтеза различных гетероциклических производных на основе бис(2-хлорпропенил)селенида в основно-восстановительной системе гидразингидрат-КОН.



## Литература

1. Patai's chemistry of functional groups. Organic selenium and tellurium compounds. Ed. Z. Rappoport – Chichester: John Wiley and Sons, 2013 – 1678 p
2. Singh F.V., Wirth T. *Catalysis Science & Technology*, 2019, **9**, 1073.
3. Patra A. et al. *JACS*, 2008, **130**, 6734.
4. Sahu P. K. et al. *Organic letters*, 2014, **16**, 5796.

Спектральные и аналитические данные были получены с использованием оборудования Байкальского аналитического центра коллективного пользования ИрИХ СО РАН.

# ПОЛУЧЕНИЕ СПИРОПРОИЗВОДНЫХ 2-СЕЛЕНОКСОГИДАНТОИНОВ И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ И АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТИ

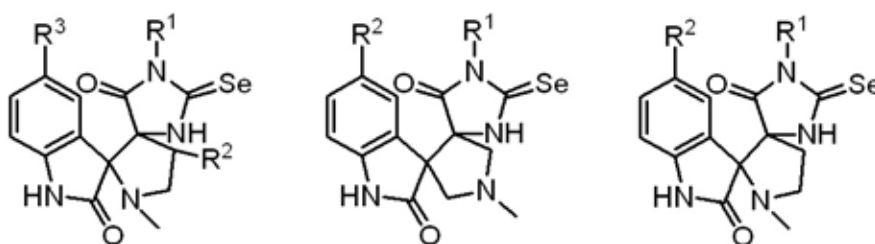
Новоторцев В.К., Белоглазкина Е.К.

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
химический факультет, 119234, Москва, Ленинские горы 1стр3,  
e-mail: vladnov9216@rambler.ru*

Диспироиндолиноны являются одним из классов соединений, действующих по механизму таргетной терапии. Их использование в качестве противоопухолевых агентов основано на их способности к ингибированию белок-белкового взаимодействия p53-MDM2, благодаря чему p53 возобновляет выполнение своей функции клеточного регулятора<sup>1</sup>.

Также известно, что эбселен и другие селенорганические соединения, проявляют выраженные антиоксидантные свойства за счет имитации действия глутатионпероксидазы<sup>2</sup>. С другой стороны, описаны примеры проявления эбселеном цитотоксического действия, основанного на увеличении формирования в клетке активных форм кислорода<sup>3</sup>.

В данной работе разработаны методы синтеза диспироиндолинонов, содержащих в своей структуре селеногидантоиновый фрагмент, реакциями 1,3-диполярного циклоприсоединения азометинилидов к производным 5-арилиден- и 5-индолиден-2-селеногидантоинов.



В рамках выполнения данной работы был проведен синтез серий диспироиндолинонов вышеуказанных структурных типов, а также их биологическое тестирование на цитотоксичность и про-/антиоксидантные свойства.

## Литература

1. Vogelstein B., Lane D., Levine A.J. *Nature*, 2000, **408**, 307.
2. Schewe T. *General Pharmacology*, 1995, **26**, 6, 1153-1169.
3. Zhang L., Zhou L., Du J., Li M., Qian C., Cheng Y., Peng Y., Xie J., Wang D. *BioMed Research International*, **2014**, 2014.

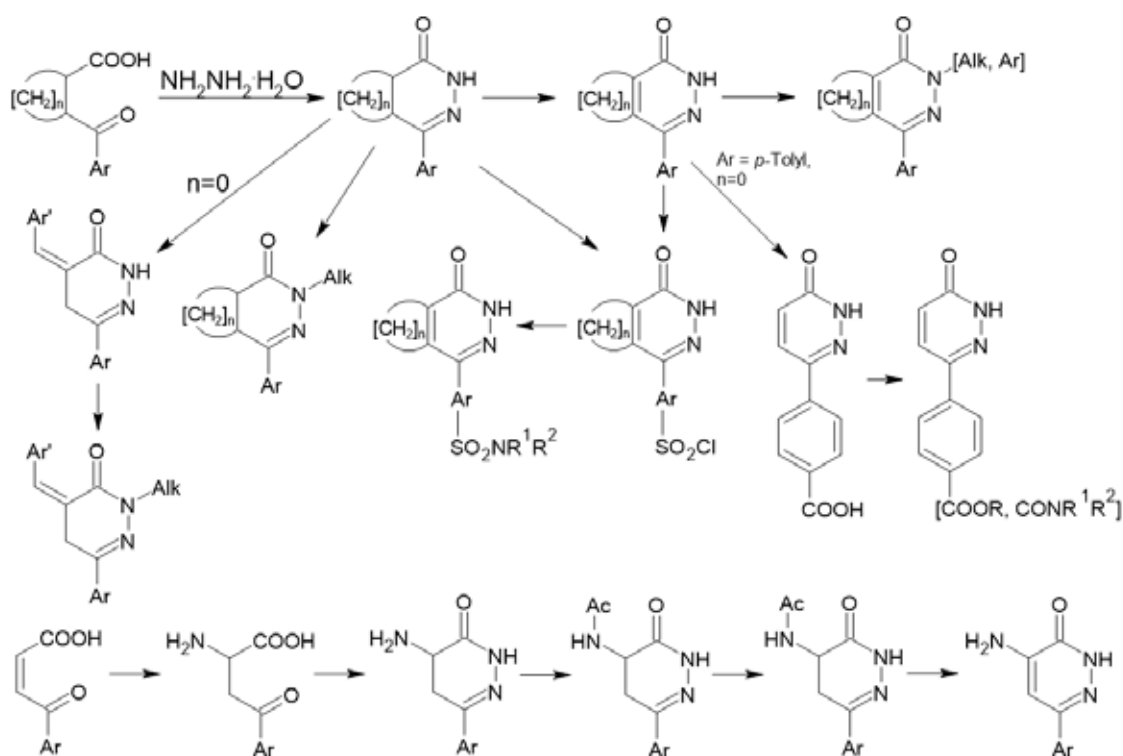
*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 21-13-00023) и РФФИ (грант 20-33-90008).*

# СИНТЕЗ И РЕАКЦИИ 6-АРИЛ-4,5-ДИГИДРО-3(2H)-ПИРИДАЗИНОНОВ И 6-АРИЛ-3(2H)-ПИРИДАЗИНОНОВ

**Овчинников К.Л., Ларионов Н.Н., Старостин М.В., Колобов А.В.**

Ярославский государственный технический университет, Московский просп., 88, Ярославль, 150023,  
e-mail: ovchinnikovkl@ystu.ru

Разработаны методики и осуществлен синтез серии замещенных 6-арил-4,5-дигидро-3(2H)-пиридазинонов и 6-арил-3(2H)-пиридазинонов в соответствии со схемой. Общее число полученных веществ более 2000<sup>1</sup>.



n = 0, 4

## Литература

1. Modern Trends of Organic Chemistry in Russian Universities / Konovalov A.I., Antipin I.S., Burilov V.A. *et al.* // Russian Journal of Organic Chemistry. 2018. T. 54. № 2. С. 157-371. DOI: 10.1134/S107042801802001X

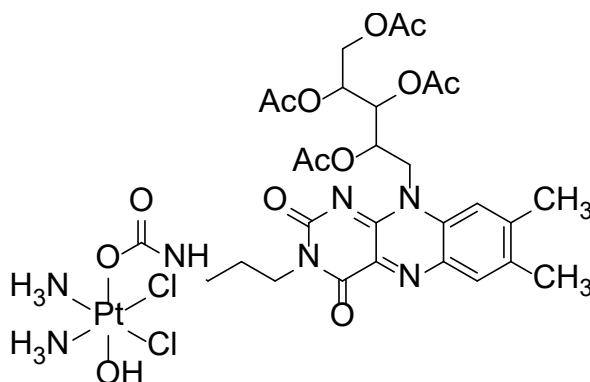
## ПРОЛЕКАРСТВА Pt(IV) С КОНТРОЛИРУЕМЫМ ВЫСВОБОЖДЕНИЕМ НА ОСНОВЕ РИБОФЛАВИНА

**Павлов К.Г.**, Спектор Д.В., Красновская О.О., Акасов Р.А., Скворцов Д.А., Костюков А.А.,  
Кузьмин В.А., Ванеев А.Н., Ерофеев А.С., Горелкин П.В., Штиль А.А.,  
Белоглазкина Е.К., Мажуга А.Г.

*Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1,3,  
e-mail: kirill.pavlov2011@mail.ru*

Пролекарства Pt(IV) представляют собой альтернативу применяемым в терапии платиновым препаратам за счет их большей биодоступности и возможности варьирования свойств препарата введением в аксиальные положения комплекса Pt(IV) лигандов различной природы<sup>1</sup>.

В данной работе было синтезировано пролекарство Pt(IV), содержащее в аксиальном положении фрагмент рибофлавина, которое способно восстанавливаться в клеточной среде под воздействием излучения 450 нм.



Полученный комплекс был охарактеризован методами ЯМР спектроскопии (<sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>195</sup>Pt) и масс-спектрометрии высокого разрешения. Цитотоксичность пролекарства Pt(IV) исследовали с использованием МТТ-теста и на 3D клеточной опухолевой модели. Механизм фотовосстановления определяли согласно данным люминесцентной спектроскопии методами времякоррелированного счёта фотонов и импульсного фотолиза.

Таким образом, объединение подходов фотодинамической терапии и стратегии пролекарств Pt(IV) позволяет получать селективные противоопухолевые препараты и является перспективным направлением развития химии цитотоксических агентов.

### Литература

1. Johnstone T.C., Suntharalingam K., Lippard S.J. The Next Generation of Platinum Drugs: Targeted Pt(II) Agents, Nanoparticle Delivery, and Pt(IV) Prodrugs, *Chem. Rev.*, 2016, **116**, 3436–3486.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-74-10059.*

# НОВЫЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ ХЕМОСЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ 1,8-НАФТАЛИМИДА ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ КАТИОНОВ МЕТАЛЛОВ В ВОДНЫХ СРЕДАХ

[Павлова М.А.](#),<sup>а</sup> Позднякова О.А.,<sup>б</sup> Панченко П.А.,<sup>а,б</sup> Федорова О.А.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup> Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,  
119991, Москва, ул. Вавилова, 28  
e-mail: pavlova\_m@ineos.ac.ru

<sup>б</sup> Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,  
125480, Москва, Миусская пл., 9

Качественное и количественное распознавание катионов в растворах на сегодняшний день является актуальной задачей экологии, а также медицинской и биологической химии<sup>1</sup>. Особое внимание уделяется разработке флуоресцентных сенсорных систем, так как современный уровень развития методов оптической спектроскопии позволяет проводить высокочувствительный анализ быстро и относительно просто.

Данная работа посвящена получению флуоресцентных хемосенсоров на биогенные металлы **1** и **2** (рис.1) на основе оптической платформы 4-метокси-1,8-нафталимида. Выбор метокси-группы в качестве заместителя в четвертом положении нафталимидного ядра обусловлен способностью 4-метокси-нафталимидов проявлять интенсивную люминесценцию в водных средах в отличие от 4-амино-производных<sup>2</sup>.

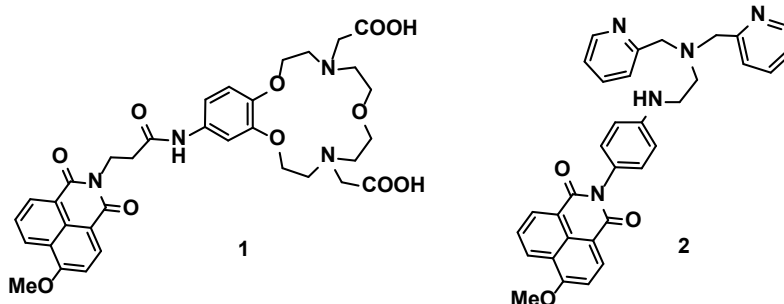


Рисунок 1. Структуры флуоресцентных сенсоров **1** и **2**.

В рамках данной работы были синтезированы сенсоры **1** и **2**, содержащие азакраун-эфирный и бис(пиридин-2-илметил)этилендиаминовый рецепторный фрагменты. Оптические свойства и комплексообразующая способность **1** и **2** были изучены в растворах ацетонитрила и в водных средах методами оптической и ЯМР-спектроскопии.

## Литература

1. Panchenko P.A., Fedorova O.A., Fedorov Yu V., *Russ. Chem. Rev.*, 2014, **83**, 155-182.
2. Panchenko P.A., Fedorov Yu V., Fedorova O.A. et al., *Russ. Chem. Bull.*, 2009, **58**, 1233-1240.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-73-10186.

# СИНТЕЗ И АНАЛЬГЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 3-(9-АНТРИЛМЕТИЛЕН)- И 3-(ГЕТЕРОНАФТИЛМЕТИЛЕН)- 3H-1,4-БЕНЗДИАЗЕПИН-2-ОНОВ

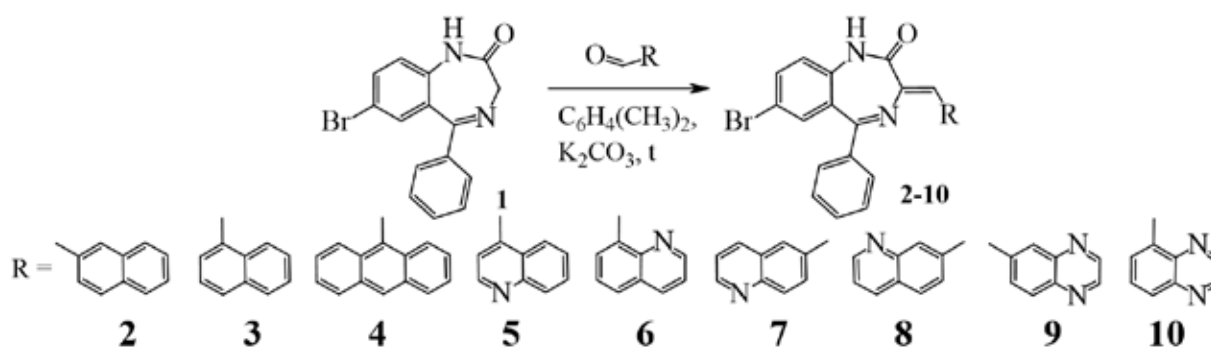
**Павловский В.И.**,<sup>а</sup> Бачинский С.Ю.,<sup>б</sup> Халимова Е.И.,<sup>б</sup> Кабанова Т.А.,<sup>б</sup>  
Ишков Ю.В.,<sup>в</sup> Андронати С.А.<sup>б</sup>

<sup>а</sup> ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»  
634050, Россия, г. Томск,  
проспект Ленина, 30, e-mail: pavlovsky@tpu.ru

<sup>б</sup> Физико-химический институт им. А.В. Богатского НАН Украины,  
65080, Украина, г. Одесса, Люстдорфская дорога, 86

<sup>в</sup> Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова,  
65000, Украина г. Одесса, ул. Дворянская, 2

Конденсацией 1,4-бензодиазепин-2-она **1** с 2-нафталин-, 9-антрацен- и рядом хинолин- и хиноксалинкарбальдегидов был синтезирован ряд 3-замещённых 1,4-бензодиазепин-2-онов **2-10**.



В ряду синтезированных соединений в опытах *in vivo* на мышах по тесту «куксунокислые корчи» обнаружены проявляющие анальгетическую активность, значительно превосходящую соединение сравнения - диклофенак натрия (рис. 1).

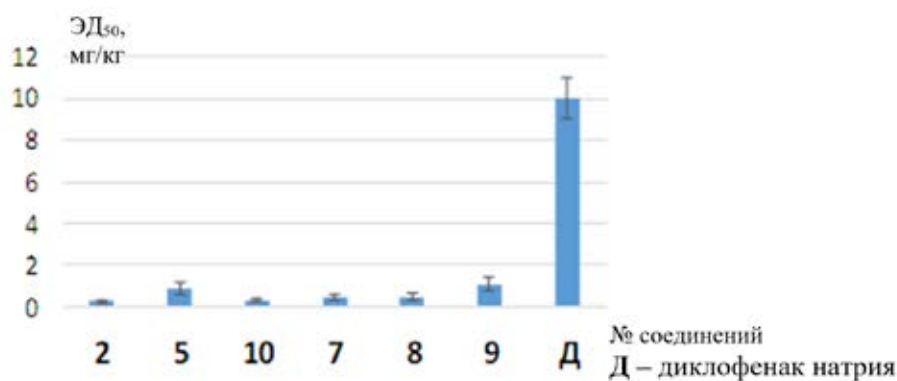


Рисунок 1. Анальгетическая активность в опытах *in vivo* новых производных бензодиазепина

# ФАРМАКОКИНЕТИКА ИННОВАЦИОННОГО АНТИТРОМБОТИЧЕСКОГО ЛЕКАРСТВЕННОГО СРЕДСТВА – ПРОИЗВОДНОГО ИНДОЛИНОНА

[Павловский В.И.](#)<sup>а,б</sup>, Леонов К.А.<sup>а</sup>, Вишенкова Д.А.<sup>б</sup>

<sup>а</sup>ООО «Инновационные фармакологические разработки»,  
634021, Россия, Томск, ул. Елизаровых 79/4,  
e-mail: leonov\_k90@mail.ru

<sup>б</sup>ФГАОУ ВО Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
634050, Россия, Томск, проспект Ленина, 30,  
e-mail: pavlovsky@tpu.ru

Сердечно-сосудистые заболевания традиционно остаются ведущей причиной смертности у людей, и один из основных факторов этого явления – атеросклероз. Для профилактики и лечения сосудистых тромбообразований томской компанией «Ифар» разработано новое антитромботическое лекарственное средство – производное индолинона (кодовое наименование – GRS)<sup>1</sup>. Полученное соединение (рисунок 1), обладая новым механизмом действия, активирует растворимую гуанилатциклазу и ингибирует агрегацию тромбоцитов, а также проявляет антигипертензивные и кардиопротекторные свойства.

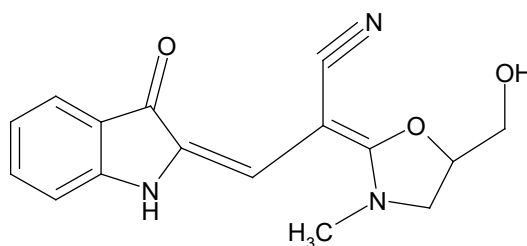


Рисунок 1. Структурная формула GRS

В рамках доклинических испытаний нового фармакологически активного соединения проведены его ВЭЖХ/УФ и ВЭЖХ/МС определения в различных биологических средах крыс и кроликов. Установлены фармакокинетические параметры вещества при дозовой линейности, многократном введении, абсолютной и относительной биодоступности.<sup>2</sup> Изучена элиминация лекарственного средства с мочой и калом, идентифицированы метаболиты в плазме крови, экскретах и смывах с ЖКТ, исследовано распределение по органам и тканям. В процессе клинических испытаний доказаны безопасность и эффективность нового ЛС и изучены фармакокинетика и метаболизм с использованием биоматриц человека.

## Литература:

1. Граник В.Г., Рябова С.Ю., Григорьев Н.Б. Успехи химии, 1997, **66 (8)**, 792.
2. К.А. Leonov, D.A. Vishenkova at. all. Journal of Chromatography B, 2020, **1160**.

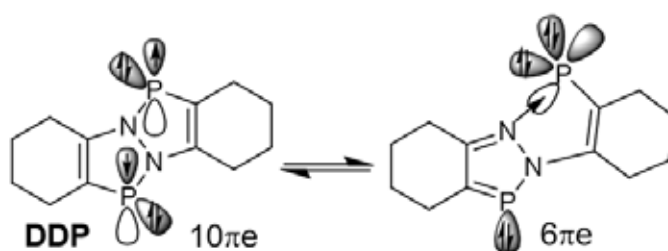


# ДИАЗАДИФОСФАПЕНТАЛЕНЫ КАК СТАБИЛИЗИРОВАННЫЕ ФОСФИНИДЕНЫ В ХИМИИ С БОРАНАМИ

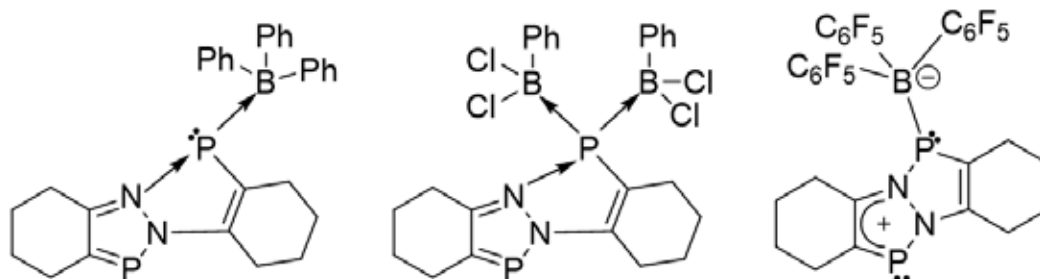
[Панова Ю.С.](#), Христюлова А.В., Корнев А.Н.

*Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева Российской Академии Наук,  
603137, г. Нижний Новгород, ул. Тropicина 49  
e-mail: panovayulya@yandex.ru*

Диазидифосфопенталены (DDP) представляют новый класс 10π-ароматических гетеропенталенов, содержащих цепочку атомов PNNP. Установлено, что DDP являются стабилизированной формой, так называемых, скрытых фосфиниденов<sup>1</sup>.



Ввиду фосфиниденовой природы DDP способны образовывать комплексы как со слабыми,<sup>1</sup> так и с более сильными кислотами Льюиса<sup>2</sup>. Интересно, что каталитические количества Ph<sub>3</sub>B способствуют количественной тетрамеризации DDP.



Комплекс с (C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>3</sub>B имеет дополнительную стабилизацию за счет внутримолекулярного нековалентного P-F взаимодействия ( $J_{\text{PF}} = 271.0$  и  $219.1$  Гц).

В результате гидролиза данного комплекса происходит присоединение молекулы воды по связи P-B.

## Литература

1. Kornev A.N., Panova, Yu.S., et al., *Inorg. Chem.*, 2019, **58**, 16144.
2. Panova, Yu.S., Khristolyubova A.V., et al., *Dalton Trans.*, 2021, **50**, 5890.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-13-00400.*

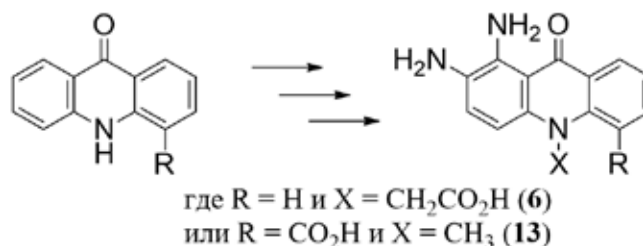
# ДИЗАЙН И СИНТЕЗ НОВЫХ NO-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ ЗОНДОВ НА ОСНОВЕ 9-АКРИДОНА

Панфилов М.А.,<sup>а,б</sup> Воробьев А.Ю.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Новосибирский институт органической химии  
им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук,  
630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д.9

<sup>б</sup>Новосибирский государственный университет, 630090, ул. Пирогова, д. 1  
e-mail: panfilov@nioch.nsc.ru

Дизайн большинства современных флуоресцентных зондов основан на сочетании флуорофора с остовом 1,2-фенилендиамина, который в присутствии кислорода реагирует с NO с образованием триазольного кольца. В настоящее время представлен широкий спектр NO-зондов на основе BODIPY, кумарина, флуоресцеина, родамина и других флуорофоров, использующих вышеупомянутый принцип определения. 1,2-диаминоантрахинон (DAQ) является коммерчески доступным и дешевым сенсором, который имеет значительное увеличение интенсивности флуоресценции при реакции с NO. Для расширения существующего спектра флуоресцентных проб мы обратили внимание на остов акридона, как близкий аналог антрахинона.



В результате работы были получены два зонда: 1,2-диамино-10-(карбоксиметил)-9(10H)-акридон (**6**) и 7,8-диамино-4-карбокси-10-метил-9(10H)акридон (**13**). Полученные вещества были описаны с помощью современных физико-химических методов и была показана способность соединения **13** улавливать оксид азота (II) в условиях клеток Jurkat.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 18-15-00049.

## РЕАКЦИИ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ 2,3-ДИАЗИДО- И 2-АЗИДОНАФТАЗАРИНОВ

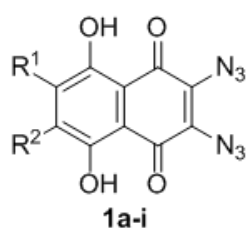
Пелагеев Д.Н.,<sup>а,б</sup> Борисова К.Л.,<sup>а</sup> Ануфриев В.Ф.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Тихоокеанский институт биоорганической химии им. Г.Б. Елякова ДВО РАН,  
690022, г. Владивосток, пр. 100 лет Владивостоку, д. 159,  
e-mail: pelageev@mail.ru

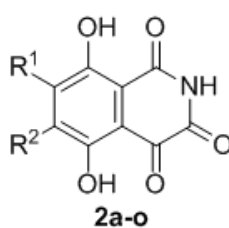
<sup>б</sup> Дальневосточный федеральный университет, г. Владивосток, 690922, о. Русский, п. Аякс, 10

Органические азиды представляют собой класс реакционноспособных синтетически полезных реагентов, которые могут быть использованы для препаративного получения широкого ряда соединений, в том числе различных азотсодержащих гетероциклов. Так, азидопроизводные нафтазарина (5,8-дигидрокси-1,4-нафтохинона) могут быть легко получены из его доступных хлорпроизводных, реакцией с азидом натрия в полярной протонной (MeOH) или апротонной (DMCO) среде.

Нами установлено, что кипячение 2,3-дiazидонафтазаринов **1a-c** в уксусной кислоте приводит к образованию соответствующих производных 5,8-дигидроксиизохинолино-1,3,4(2H)-триона **2a-c**, аналогов алкалоидов, ранее выделенных из губки *Haliclona cribricutis*<sup>1</sup>. Несимметричные 2,3-дiazидонафтазарины **1d-i**, в этих условиях, дали смеси соответствующих изомерных продуктов **2d-o**.

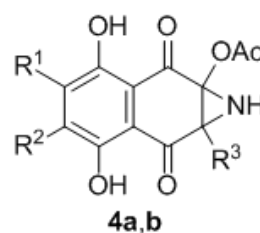
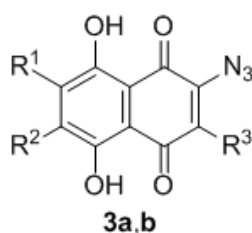


**1** R<sup>1</sup>,R<sup>2</sup>: H,H (**a**); Me,Me (**b**); OMe,OMe (**c**); H,Me (**d**); H,Et (**e**); H,OH (**f**); H,OBu (**g**); OH,Me (**h**); OH,Et (**i**).



**2** R<sup>1</sup>,R<sup>2</sup>: H,H (**a**); Me,Me (**b**); OMe,OMe (**c**); H,Me (**d**); Me,H (**e**); H, Et (**f**); Et,H (**g**); H,OH (**h**); OH,H (**i**); H,OBu (**j**); OBu,H (**k**); OH,Me (**l**); Me,OH (**m**); OH,Et (**n**); Et,OH (**o**).

Моноазидонафтазарины **3a,b** в описанных выше условиях дали соответствующие производные 1H-нафто[2,3-*b*]азирин-2,7(1aH,7aH)-диона **4a,b**.



**3,4** R<sup>1</sup>,R<sup>2</sup>,R<sup>3</sup>: H,H,H (**a**); Me,Me,Me (**b**).

Добавление в реакционную разбавленной серной кислоты приводит к замещению азидо- на гидроксигруппу, что может быть альтернативой способу получения природных (поли)гидрокси нафтазаринов и их синтетических аналогов<sup>2</sup>.

### Литература

1. Parameswaran P.S., Naik C.G., Kamat S.Y., Pramanik B.N. *Ind. J. Chem.*, 1998, **37B**, 1258.
2. Anufriev V.Ph., Novikov V.L., Maximov O.B *et al. Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 1998, **8**, 587.

# РЕАКЦИИ С–Н-АЗОЛИРОВАНИЯ ФЕНАНТРИДИНА В ПРИСУТСТВИИ РЕАГЕНТА SELECTFLUOR®

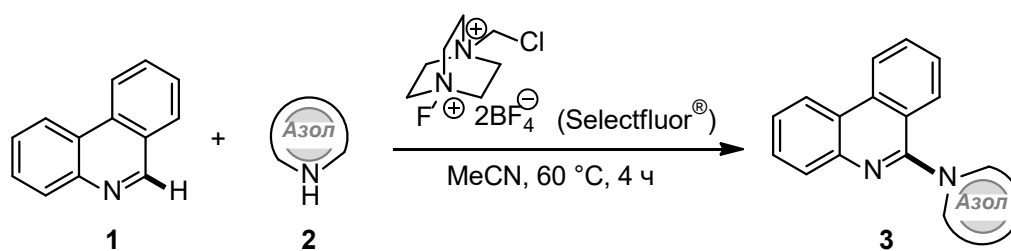
[Першин А.А.](#),<sup>а</sup> Акулов А.А.,<sup>а</sup> Вараксин М.В.,<sup>а,б</sup> Зырянов Г.В.,<sup>а,б</sup> Чупахин О.Н.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19  
e-mail: persh.andrey2015@gmail.com

<sup>б</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,  
620990, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22

Производные фенантридина представляют собой соединения, вызывающие живой интерес в контексте дизайна новых биологически активных соединений (интеркаляторов нуклеиновых кислот), а также флуоресцентных меток.<sup>1</sup> Как следствие, актуальной задачей является разработка новых эффективных методов синтеза таких производных, к числу которых можно отнести развитие подходов к прямой C(sp<sup>2</sup>)-Н-функционализации фенантридинового скаффолда.

Было выявлено, что неактивированный фенантридин **1** способен вступать в реакции С–Н-азолирования в присутствии реагента Selectfluor® с образованием новой C(sp<sup>2</sup>)-N-связи при атоме углерода, находящемся в α-положении по отношению к фенантридиновому атому азота. При этом в качестве азольных субстратов **2** могут выступать как моноциклические, так и бензаннелированные ди- и триазолы. Следует отметить, что в случае бензотриазолов выделение соответствующих продуктов **3** не требует задействования колоночной хроматографии.



В настоящее время проводится анализ фотофизических свойств полученных соединений **3**, а также устанавливается возможность их применения в качестве субстратов для дальнейших синтетических превращений.

## Литература

1. Tumir L.-M., Radić Stojković M., Piantanida I. *Beilstein J. Org. Chem.*, 2014, **10**, 2930.

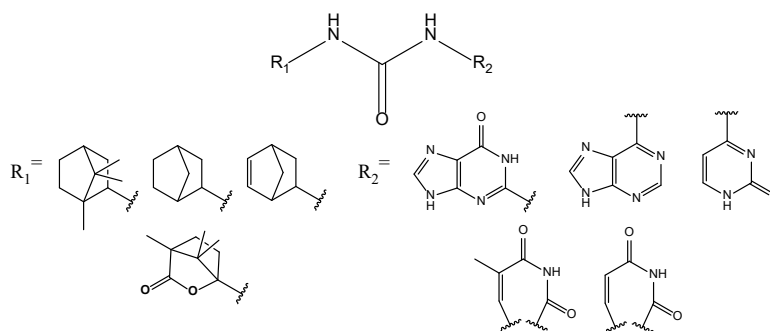
Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации, проект НШ-2700.2020.3.

# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА 1,3-ДИЗАМЕЩЕННЫХ МОЧЕВИН, СОДЕРЖАЩИХ В СВОЕЙ СТРУКТУРЕ ПРИРОДНЫЕ ЛИПОФИЛЬНЫЕ БИЦИКЛИЧЕСКИЙ ФРАГМЕНТЫ И ПРОИЗВОДНЫЕ ПУРИНА ИЛИ ПИРИМИДИНА

Питушкин Д.А., Саиф Аббас М.Х., Бурмистров В.В., Бутов Г.М.

Волжский политехнический институт (филиал) ВолгГТУ, 404121,  
 Россия, г. Волжский, ул. Энгельса, 42а  
 E-mail: kartes07@mail.ru

В работе представлены результаты исследования по созданию новых потенциальных высокоактивных ингибиторов уреидного типа для sEH, содержащие в своей структуре сразу два заместителя природного происхождения: липофильный бициклический фрагмент R<sub>1</sub>: 1-(1,7,7-триметилбицикло[2.2.1]гептильный (борнильный), бицикло[2.2.1]гептильный (норборнильный), бицикло[2.2.1]гепт-5-еновый (норборненовый) и (1S)-1-(4,7,7-триметил-3-оксо-2-оксабицикло[2.2.1]гептильный (камфановый) и фрагмент азотистого основания R<sub>2</sub>, производных пурина или пириимидина: аденин, гуанин, цитозин, тимин и урацил.



Целевые 1,3-дизамещенные мочевины были получены путем взаимодействия изоцианатов, содержащих бициклические фрагменты, с азотистыми основаниями, в присутствии триэтиламина в диметилформамиде (ДМФА) при 25 °С, с выходом до 70%. Установлено, что наиболее подходящим растворителем для проведения реакции в данных условиях, является ДМФА, обеспечивающий наилучшую растворимость исходных реагентов.

Установлено, что мочевины, содержащие в своей структуре фрагмент гуанина, тугоплавкие соединения с t пл. выше 350 °С; фрагменты тимина и урацила - плавятся с разложением в диапазоне 155-169 °С. Коэффициент липофильности соединений, содержащих в своей структуре борнильный фрагмент выше, чем у аналогичных по строению соединений, содержащих камфановый, норборнильный и норборненовый фрагмент на 0.72, 1.13 и 1.15 единиц соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-33-60024 Перспектива).

# ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ОРБИТАЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА РЕАКЦИЮ SPAAC НА ПРИМЕРЕ НОВЫХ СЕРУСОДЕРЖАЩИХ ЦИКЛОАЛКИНОВ

[Поздеев А.С.](#), Абрамов В.А., Лемпорт П.С., Ненайденко В.Г.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3.  
e-mail: anton.pozdeev.1998@gmail.com

Переход от ненапряжённых алкинов к напряжённым циклическим алкинами позволяет значительно понизить активационный барьер реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения с азидами<sup>1</sup>. При этом сегодня на первый план в химии циклоалкинов выходит повышение реакционной способности циклических алкинов за счёт варьирования электронного окружения тройной связи<sup>2</sup>.

В нашей работе мы исследовали возможность повлиять на активность серусодержащих циклоалкинов в SPAAC реакции путём изменения степени окисления атомов.

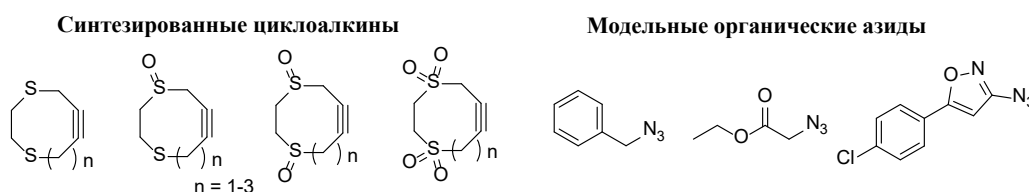


Рис. 1 Синтезированные серусодержащие циклоалкины и модельные азиды

В рамках данной работы были проведены кинетические эксперименты с применением методов ЯМР <sup>1</sup>H, квантово-химический расчёты, которые позволили провести конформационный анализ выбранных циклоалкинов, рассчитать теоретическую энергию активации и энергии граничных орбиталей.

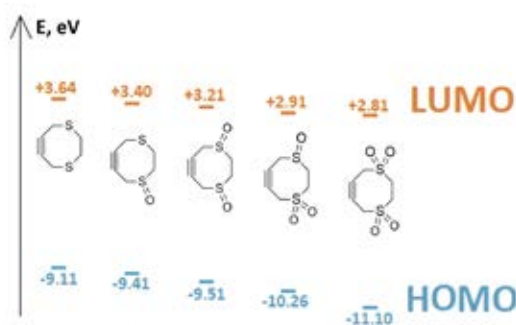


Рис. 2 Молекулярные орбитали дитиоциклооктина и его производных

Было показано, что варьирование степени окисления атомов серы в β-положении к тройной связи значительно влияет на скорость SPAAC реакции, наиболее активным алкином оказался 8-членный цикл с двумя сульфогруппами, чья умеренная растворимость в воде открывает путь для его потенциального использования в биологических системах.

## Литература

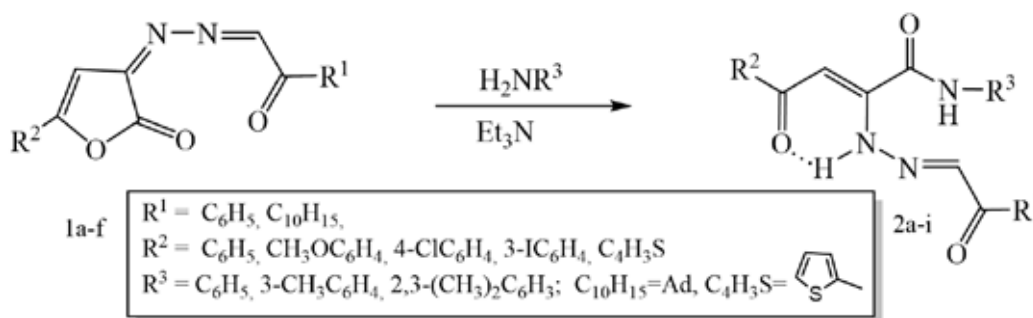
- Harris T., Gomes G. P., Ayad S., Clark R. J., Lobodin V. V., Tuscan M., Hanson K., Alabugin I. V. *Chem.*, 2017, **3**(4), 629.
- Harris T., Alabugin I. V. *Mend. Comm.* **2019**, 237.

# СИНТЕЗ 2-[(2-R-2-ОКСОЭТИЛИДЕН)ГИДРАЗИНИЛ]-4-(ГЕТ)АРИЛ-4-ОКСОБУТ-2-ЕНАМИДОВ И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ВЛИЯНИЕ НА ИНДИВИДУАЛЬНОЕ ПОВЕДЕНИЕ ЖИВОТНЫХ

**Полежаева В.Д., Пулина Н.А., Кузнецов А.С., Краснова А.И.**

ФГБОУ ВО ПГФА Минздрава России, 614990, г. Пермь., ул. Полевая, 2.  
 e-mail: polezgaevalera@inbox.ru

Реакция N-замещённых 3-[(2-R-2-оксоэтилиден)гидразоно]-5-(гет)арилфуран-2(3H)-онов (1) с ароматическими и гетероциклическими аминами позволяет получать перспективные биологически активные производные<sup>1</sup>. Представляет практический интерес введение липофильного адамантильного фрагмента в структуру производных 2,4-диоксобутановых кислот. В продолжение исследований нами установлено, что фураноны 1a-f взаимодействуют с ароматическими аминами с образованием продуктов нуклеофильного присоединения - 2-(2-R-2-оксоэтилиден)гидразинил-4-арил-4-оксо-N-арилбут-2-енамидов (2a-i). Реакция протекает при кипячении эквимолекулярных количеств реагентов в присутствии триэтиламина в абсолютном толуоле с хорошими выходами целевых продуктов по схеме:



Влияние соединений 2 на индивидуальное поведение животных изучено в тесте «открытое поле» на белых нелинейных крысах по стандартной методике<sup>2</sup>. Установлено, что амиды 2 не оказывают негативных изменений на показатели локомоторной, ориентировочно-исследовательской активности и эмоционального состояния. Обнаружены вещества, достоверно увеличивающие заходы в центральную зону и активизирующие груминг у крыс, что является поведенческим маркером стрессоустойчивости и возможного анксиолитического действия. Выявлены закономерности строения соединений 2 с изучаемой биологической активностью для дальнейшего синтеза и поиска новых отечественных фармацевтических субстанций.

## Литература

- Пулина И.А., Собин Ф.В., Кожухарь В.Ю. [и др]. *Хим.-фарм. журн.*, 2014, **48**, 14.
- Мионов А.Н. Руководство по проведению доклинических исследований лекарственных средств. Часть первая / М.: Гриф и К. 2013. – 944с.

# СИНТЕЗ И СВОЙСТВА НОВЫХ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ [1]БЕНЗОТИЕНО[3,2-В][1]-БЕНЗОТИОФЕНА С РАЗЛИЧНОЙ ДЛИНОЙ ТЕРМИНАЛЬНОГО АЛИФАТИЧЕСКОГО ЗАМЕСТИТЕЛЯ

Полинская М.С., Борщев О.В., Скоротецкий М.С., Чекусова В.П.,  
Труль А.А., Пономаренко С.А.

*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской Академии  
Наук, 117393, Москва, ул. Профсоюзная, 70,  
e-mail: polinskaya@ispm.ru*

В настоящее время в органической электронике большое внимание уделяется полупроводниковым материалам на основе [1]бензотиено[3,2-в][1]-бензотиофена (ВТВТ) благодаря наличию у них высокой подвижности носителей заряда и устойчивости молекул<sup>1</sup>. Один из наиболее перспективных, быстрых и воспроизводимых подходов для изготовления электронных устройств является использование Лэнгмюровских технологий<sup>2</sup>. Полученные ранее данные позволяют нам сделать выводы, что производные ВТВТ, имеющие в своем составе якорную силоксановую группу и оптимальной длины алифатический спейсор, демонстрируют достаточно высокие полупроводниковые характеристики при нанесении пленок методами Лэнгмюра<sup>3</sup>. Однако, влияние терминальных алифатических заместителей, которые вводятся в структуру молекулы для повышения растворимости соединения, на полупроводниковые свойства материала детально не исследовалось. В связи с этим в работе был проведен синтез и исследование свойств кремнийорганических производных ВТВТ с различной длиной терминальных алифатических заместителей, а также изучение влияния длины такого заместителя на полупроводниковые характеристики материала.

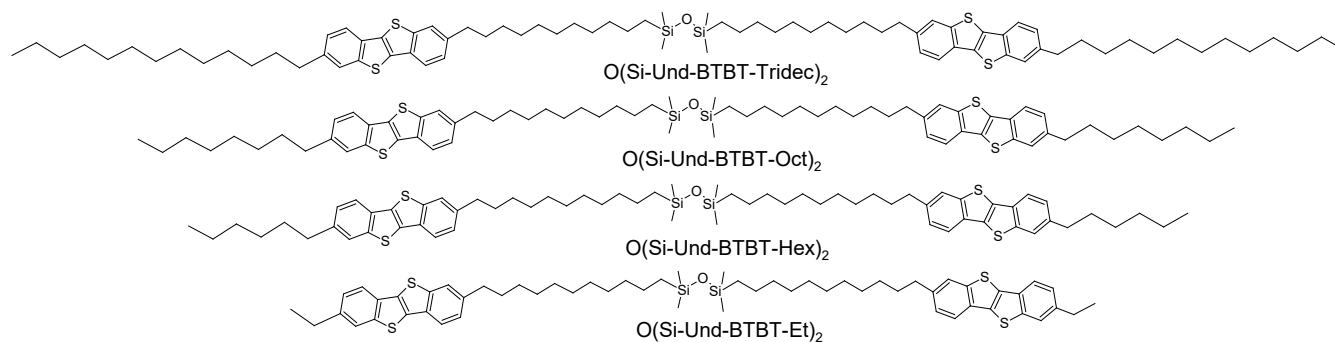


Рисунок 1. Структурные формулы синтезированных соединений.

## Литература

1. Y. Yuan and all, *Nat. Commun.*, 2014, **5**, 3005.
2. A. S. Sizov and all, *Langmuir*, 2014, **30**, 15327.
3. A.A Trul and all, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2020, **321**, 128609.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №19-73-30028.*



# СИНТЕЗ НОВЫХ NO-ДОНОРНЫХ ФОТОПЕРЕКЛЮЧАТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АРИЛАЗОФУРОКСАНОВ

Полковниченко М.С., Жилин Е.С., Ферштат Л.Л.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН 119991 Москва, Ленинский просп. 47  
 E-mail: aaaa0000www4444@yandex.ru

Синтез соединений, способных донорить NO в физиологических условиях, неизменно сохраняет высокую актуальность в фармакологии и медицинской химии. Помимо нитроглицерина, который на данный момент является самым распространённым соединением для повышения концентрации NO, существуют производные фуруксанов с высокой способностью донирования оксида азота (II). Стоит также отметить, что для более тщательного управления свойствами лекарств в последние годы активно развивается фотофармакология. Поэтому целью данной работы является синтез и изучение свойств арилазофуруксанов. Была предложена методика синтеза целевых соединений, представленная на схеме 1. Предложенный подход позволяет успешно вводить в реакцию аминифуруксаны, содержащие различные ароматические заместители при фуруксановом цикле, а также 3-алкил-4-аминофуруксаны и функционально замещённые 4-аминофуруксаны. Во всех случаях целевые азосоединения **4** были получены с высокими выходами. Некоторые синтезированные арилазофуруксаны **4** оказались склонны к фотоизомеризации при облучении видимым светом, причем во всех случаях протекала селективная изомеризация N=N связи (*E* → *Z*), в то время как изомеризации N-оксидного фрагмента фуруксанового цикла не наблюдалось. Кроме того, нами было обнаружено, что (*Z*)-арилазофуруксаны являются гораздо более эффективными NO-донорами, чем соответствующие (*E*)-изомеры.

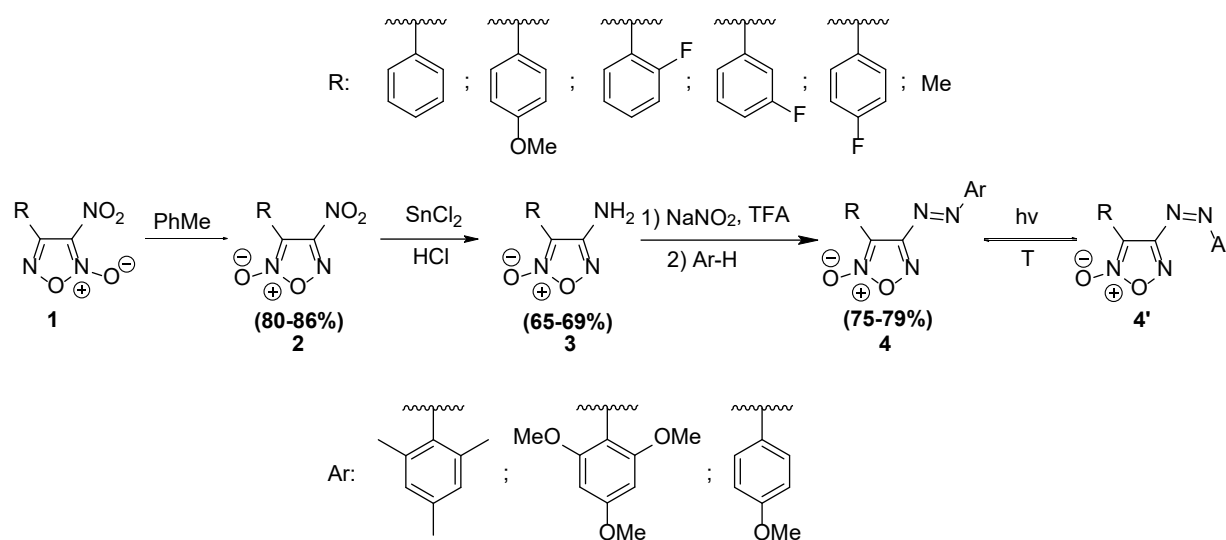


Схема 1. Синтез арилазофуруксанов.

## Литература

- Zhilin E.S., Polkovnichenko M.S., Ananyev I.V., Fershtat L.L., Makhova N.N. *ChemPhotoChem*, 2020, 4, 12, 5346-5354

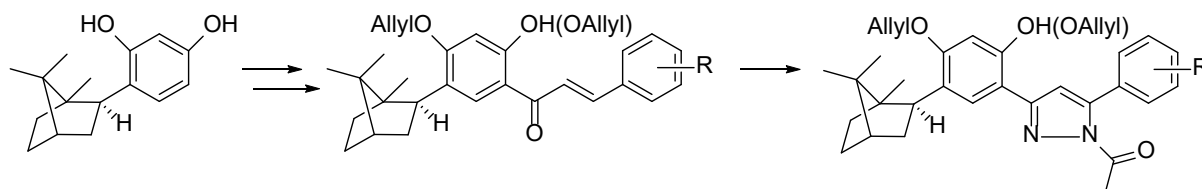
# ИЗОБОРНИЛХАЛКОНЫ КАК ОСНОВА ДЛЯ СИНТЕЗА ДИАРИЛПИРАЗОЛИНОВ С АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

[Попова С.А.](#)<sup>а</sup>, Павлова Е.В.<sup>а</sup>, Шевченко О.Г.<sup>б</sup>, Чукичева И.Ю.<sup>а</sup>, Кучин А.В.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> *Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, 167000, Сыктывкар, Первомайская 48*  
*e-mail: popova-sa@chemi.komisc.ru*

<sup>б</sup> *Институт биологии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, 167982, Сыктывкар, Коммунистическая 28*

Пиразолиновое кольцо определяется как «привилегированная структура» в медицинской химии. Разнообразие фармакологических свойств пиразолинов связано с природой и положением различных заместителей. Соединения с фрагментом халкона проявляют широкий спектр биологических свойств, а также высокую реакционную способность, которая в первую очередь обусловлена наличием  $\alpha,\beta$ -ненасыщенной карбонильной системы. В то же время бициклические монотерпеноиды заслуживают особого внимания как источник ключевого структурного блока или как один из фармакофорных компонентов биологически активных молекул.



Синтезирован ряд новых производных диарилпиразолина на основе изоборнилхалконов с различными заместителями (MeO, Cl, Br, NO<sub>2</sub>, N(Me)<sub>2</sub>). Антиоксидантные свойства полученных соединений были исследованы с использованием *in vitro* модели Fe<sup>2+</sup>/аскорбат-инициированного перекисного окисления липидов в субстрате, содержащем липиды мозга лабораторных мышей. Показано, что сочетание электронодонорной группы в пара-положении кольца В и OH-группы в кольце А в структуре халконового фрагмента обеспечивает значительную антиоксидантную активность синтезированных производных диарилпиразолина.

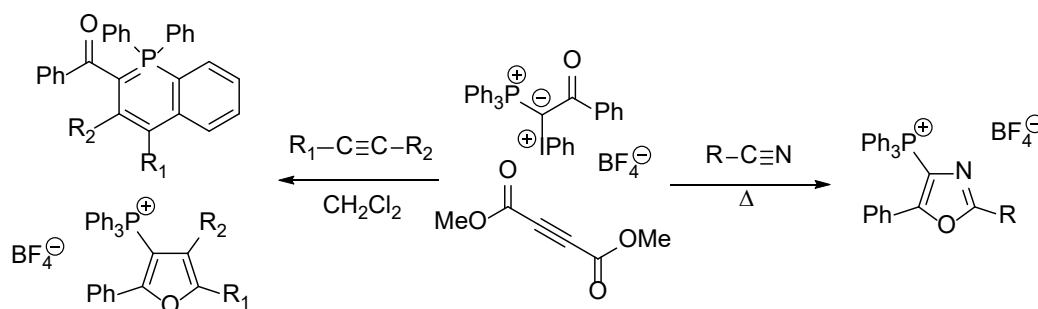
*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 21-73-20091. Исследование антиоксидантной активности соединений проводилось в рамках государственного задания, рег. № АААА-А18-118011120004-5.*

# НОВЫЕ АСПЕКТЫ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ СМЕШАННЫХ ФОСФОНИЕВО-ИОДОНИЕВЫХ ИЛИДОВ В ПРОЦЕССАХ ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИИ

Потапов И.Д., Вознярский А.Ю., Подругина Т.А.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
 Химический факультет, 119992, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3  
 e-mail: redtum@mail.ru

Начатые в начале 2000-ных годов под руководством академика Н.С. Зефирова, эти исследования продолжают до сих пор, выявляя новые закономерности сложных и разнообразных процессов гетероциклизации при взаимодействии смешанных илидов с соединениями, содержащих кратные связи ( $C\equiv C$  и  $C\equiv N$ ). Ранее было установлено, что смешанные илиды являются уникальными предшественниками для создания как новых фосфорсодержащих гетероциклических систем, так и достаточно труднодоступных тетраарил- и тетрагетарилфосфониевых солей<sup>1</sup>. Взаимодействие смешанных илидов с алкинами до настоящего времени было изучено только в условиях фотохимического процесса, в то же время взаимодействие с нитрилами возможно как в условиях фотохимической реакции, так и при нагревании нитрилов со смешанными илидами в присутствии диполярфилов, например, ацетилендикарбонового эфира (ДМАД)<sup>2,3</sup>. В рамках настоящего исследования было установлено, что гетероциклизация фосфониево-иодониевых илидов с ацетиленами успешно протекает в присутствии ДМАД, приводя к образованию фосфинолинов и фосфонийзамещенных фуранов. С помощью метода ЭПР было установлено, что интермедиаты этого процесса представляют собой радикалы.



## Литература

1. Matveeva E.D., Podrugina T.A., Taranova M.A., Melikhova E.Yu., Gleiter R., Zefirov N.S.. *Tetrahedron*, 2013, 69, 35, 7395-7402.
2. Matveeva E.D., Podrugina T.A., Pavlova A.S., Mironov A.V., Gleiter R., Zefirov N.S.. *Eur. J. Org. Chem.*, 2009, 14, 2323-2327.
3. Matveeva E.D., Podrugina T.A., Pavlova A.S., Mironov A.V., Zefirov N.S.. *Russian Chemical Bulletin*, 2008, 57, 10, 2237-2239.

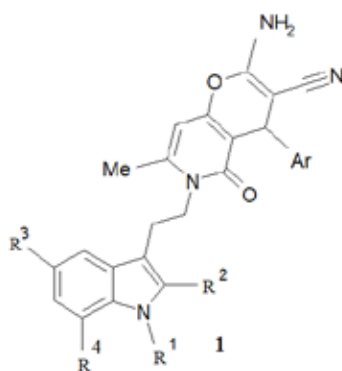
# ЦИТОТОКСИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ПИРАНОПИРИДОНОТРИПТАМИНОВ

**Пржевальский Н.М.<sup>1</sup>, Аникина Л.В.<sup>2</sup>, Глоба А.А.<sup>2</sup>, Токмаков Г.П.<sup>1</sup>,  
Лайпанов Р.К.<sup>1</sup>, Вершинкин Д.А.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Российский государственный аграрный университет-МСХА  
имени К. А. Тимирязева, 127550, Москва, Тимирязевская ул., 49  
e-mail: prjevalski@mail.ru*

<sup>2</sup> *Институт физиологически активных веществ РАН, 142432,  
Московская область, г. Черноголовка, Северный проезд, 1,  
e-mail: anikina1970@gmail.com*

Продолжая работу по синтезу и изучению биологических свойств пиранопиридонотриптаминов **1**,<sup>1-3</sup> мы обнаружили у ряда соединений достаточно высокую цитотоксическую активность.



**1** R<sup>1</sup>=H, alkyl, aryl; R<sup>2</sup>=Me, Ph; R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>=H, alkyl, aryl, O-alkyl, Hal; Ar=Ph, subst. Ph, hetaryl

Цитотоксичность синтезированных соединений *in vitro* была определена по МТТ-тесту культуры клеток человека А549 (карцинома лёгкого) и НСТ116 (карцинома кишечника). В качестве эталонов использовали камтотецин, даунорубицин и доксорубицин. Значение концентрации, вызывающее 50% ингибирование роста популяции клеток (IC<sub>50</sub>), было определено на основе дозозависимых кривых с помощью программного обеспечения OriginPro 9.0. Лучшие результаты показали соединения **1a** R<sup>1</sup>=H, R<sup>2</sup>=Me, R<sup>3</sup>=R<sup>4</sup>=Br, Ar=2,3-di-OMe-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub> и **1b** R<sup>1</sup>=H, R<sup>2</sup>=Me, R<sup>3</sup>=R<sup>4</sup>=Br, Ar=4-F-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>. Для изучения механизма действия соединений **1a, b** методом проточной цитометрии в качестве культуры клеток была выбрана культура Jurkat (Т-лимфобластный лейкоз). Жизнеспособность опухолевых клеток была определена с помощью ресазурина-теста, препараты сравнения камтотецин, даунорубицин. Соединения **1a** и **1b** в этом тесте показали заметную цитотоксичность - 1,47±0,06 и 4,56±0,19 мкМ соответственно. Предполагается, что эффект проявляется в некотором (возможно обратимом) аресте клеточного цикла в пресинтетическую фазу.

## Литература

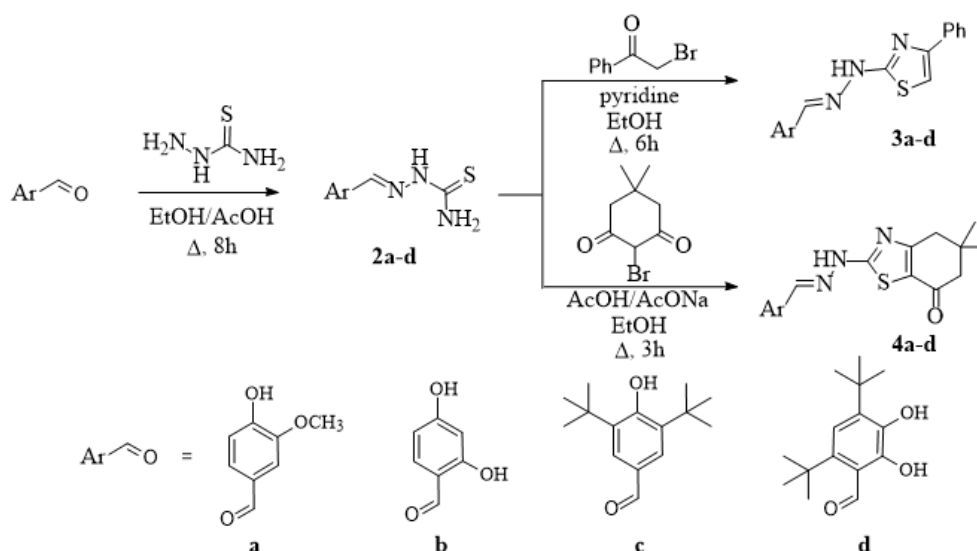
1. Пржевальский Н. М., Лайпанов Р. К., Токмаков Г. П., Рожкова Е. Н. *Известия ТСХА*, 2017, **3**, 146.
2. Пржевальский Н. М., Лайпанов Р. К., Токмаков Г. П., Нам Н. Л. *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2016, **7**, 1709.
3. Пржевальский Н. М., Лайпанов Р. К., Токмаков Г. П., Лукина И. В., Вершинкин Д. А., Тафеенко В. А. Там же. 2021, **3**, 555.

# СИНТЕЗ И АНТИОКИСЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛА С ФЕНОЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ

**Примерова О.В., Кошелев В.Н., Ступникова А.С.**

*РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, 119991, Москва, Ленинский проспект, 65  
e-mail: primerova92@yandex.ru*

Активные формы кислорода вызывают появление окислительного стресса, который связан со многими дегенеративными заболеваниями, такими как рак, атеросклероз, болезнь Альцгеймера. Антиоксиданты способны улавливать свободные радикалы и подавлять процессы окислительного стресса<sup>1</sup>. В последние годы интерес исследователей вызывает поиск гибридных антиоксидантов, веществ, которые сочетают в себе высокую антиоксидантную активность и другие фармакологические эффекты<sup>2</sup>. Перспективным подходом в поиске таких антиокислителей считается сочетание в одной молекуле фрагмента фенола и гетероцикла<sup>3</sup>. В настоящей работе были получены неописанные ранее производные тиазолов с фрагментами фенолов, путем взаимодействия тиосемикарбазонов с бромацетофеноном и бромдимедоном.



Для полученных соединений была определена антирадикальная активность по скорости взаимодействия с ABTS+.

## Литература

1. Burlakova E., Molochkina E., Nikiforov G. *Chemical and Biochemical Physics, Kinetics and Thermodynamics: New Perspectives*. 2008, 2007, 1.
2. Nepovimova E. *Journal of medicinal chemistry*, 2014, 57, 20, 8576.
3. Bogdanov. *Russian Journal of General Chemistry*. 2018, 88, 1, 57.

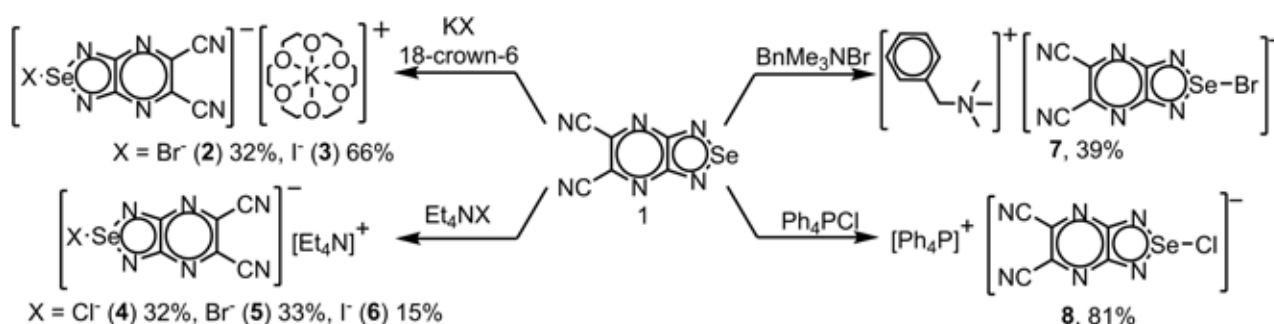
# 5,6-ДИЦИАНО-1,2,5-СЕЛЕНАДИАЗОЛО[3,4-В]ПИРАЗИН – ЭФФЕКТИВНЫЙ АКЦЕПТОР ЭЛЕКТРОНОВ

**Радюш Е.А., Семенов Н.А., Зибарев А.В.**

Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова  
Сибирского Отделения Российской Академии Наук,  
630090, Новосибирск, проспект Лаврентьева 9,  
e-mail: iokimaru@nioch.nsc.ru

Интересное свойство 1,2,5-халькогенадиазолов – способность образовывать так называемые халькогеновые связи – вторичные связывающие взаимодействия между не поделённой парой основания Льюиса с областью локального положительного электростатического потенциала на халькогене –  $\sigma$ -дыркой. Участие 1,2,5-халькогенадиазолов в образовании таких комплексов открыто недавно и пока слабо изучено<sup>1</sup>.

Настоящая работа охватывает несколько примеров указанной выше реакционной способности 5,6-дициано-1,2,5-селенадиазоло[3,4-*b*]пиразина **1** – нового сильного акцептора. Взаимодействие соединения **1** с основаниями Льюиса даёт донорно-акцепторные комплексы **2-8**, которые были изолированы и охарактеризованы рентгеноструктурным анализом. Халькогеновая связь Se...X (X = Cl, Br, I) в таких комплексах длиннее суммы ковалентных радиусов, и короче суммы Ван дер Ваальсовых радиусов. Соединения **2-8** представляют собой новые примеры семейства анионных комплексов с халькогеновыми связями, ранее полученные только для 3,4-дициано-1,2,5-халькогенадиазолов<sup>2</sup>.



## Литература

1. Suturina E.A. et al., *J. Phys. Chem. A.*, 2011, **115** (18), 4851–4860.
2. E.A. Chulanova, N. A et al., *Mend. Comm.*, 2018, **28** (5), 453-460.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-43-543016.

# НАПРАВЛЕННАЯ МОДИФИКАЦИЯ КСАНТИНОВ НА ОСНОВЕ РЕАКЦИИ АМИНОМЕТИЛИРОВАНИЯ ИХ 8-АЛКИНИЛПРОИЗВОДНЫХ

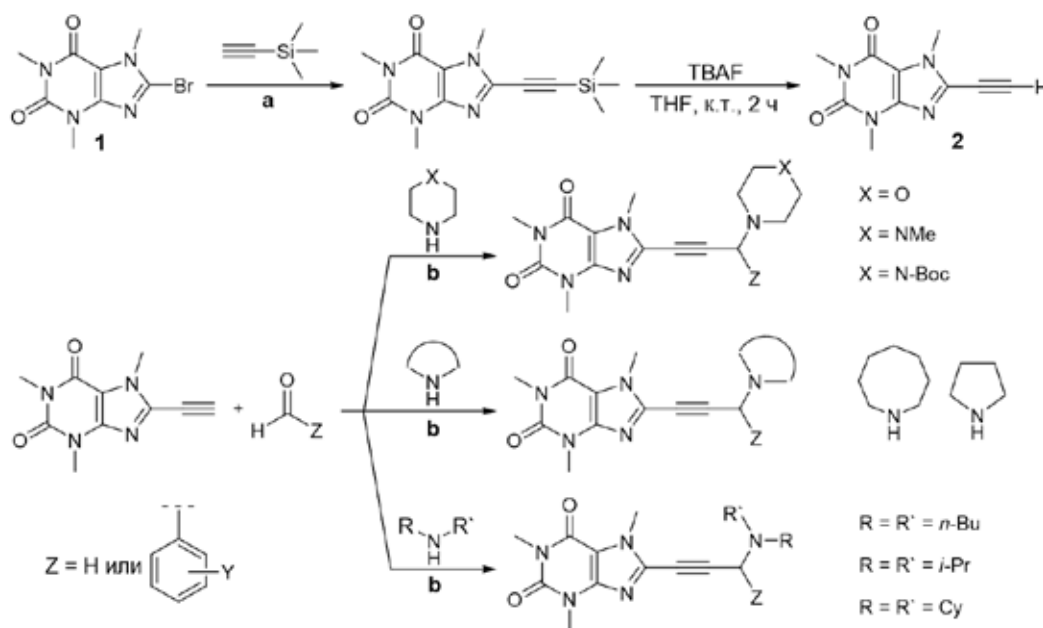
**Решетников Д.В., Патрушев С.С., Шульц Э.Э.**

Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова  
 СО РАН, 630090 Российская Федерация, Новосибирск,  
 просп. Академика Лаврентьева, 9  
 E-mail: r.danila.v@mail.ru

Известно, что синтетические модификации биологически активных соединений путем введения в структуру ацетиленовых фрагментов оказывают существенное влияние не только на выраженность фармакологического эффекта, но и позволяют получить производные с принципиально новыми свойствами. Вследствие чего имеет большой интерес трансформация положения С-8 кофеина с введением в структуру гетероциклических фрагментов, содержащих алкинильные линкеры.

Взаимодействие 8-бромкофеина (1) с триметилсилилацетиленом в условиях реакции Соногаширы с последующим снятием защитной группы приводит к 8-этинилкофеину (2) (88%).

На основе трехкомпонентной реакции сочетания 2 с циклическими и ациклическими вторичными аминами, а также широким спектром ароматических альдегидов синтезирован ряд гибридных структур, содержащих N,N-дизамещенный пропаргиламинный фрагмент (53-98%).



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ (проект № 18-13-00361)

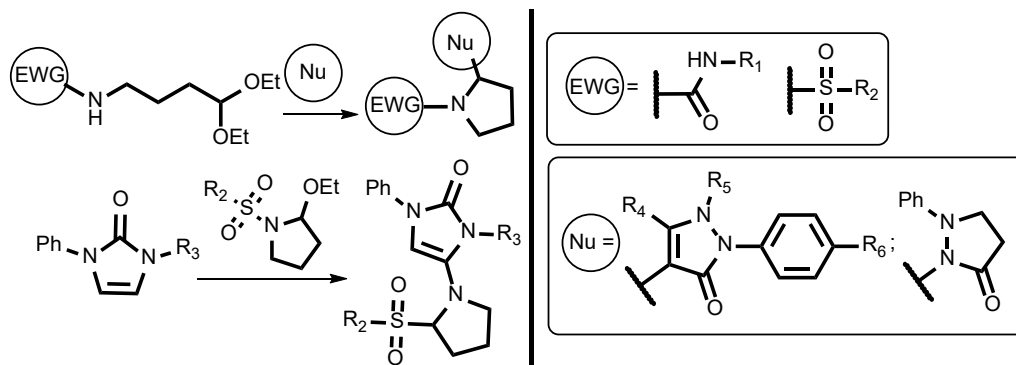
# РЕАКЦИЯ N-(4,4-ДИЭТОКСИБУТИЛ)МОЧЕВИН И N-(4,4-ДИЭТОКСИБУТИЛ)СУЛЬФОАМИДОВ С ПРОИЗВОДНЫМИ ПИРАЗОЛ-5-ОНА И ИМИДАЗОЛИН-2-ОНА

**Ризбаева Т.С., Кузнецова Е.А., Смолочкин А.В.,  
Газизов А.С., Бурилов А.Р., Пудовик М.А.**

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова  
ФИЦ Казанский научный центр РАН  
420088, Россия, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, д. 8  
rizbaeva.tanzilya.92@mail.ru*

Ацетали, содержащие мочевиный и сульфоамидный фрагменты, широко используются в качестве строительных блоков при синтезе гетероциклов. Их взаимодействие с гетероциклическими нуклеофилами играет важную роль в этих превращениях. Особый интерес вызывают пятичленные азотсодержащие гетероциклические соединения – пирролидины. Они являются важной структурной частью многих природных алкалоидов,<sup>1</sup> а так же одним из наиболее часто встречающихся гетероциклических фрагментов в лекарственных препаратах.<sup>2</sup>

В нашей лаборатории разработан удобный и простой в исполнении метод синтеза производных пирролидина, имеющих во 2 положении цикла гетероциклический фрагмент. Предложенный метод основан на одностадийной кислотно-катализируемой реакции гетероциклических нуклеофилов с N-замещёнными производными 4,4-диэтоксипутан-1-амина.



## Литература:

1. Nature Helps... / H. Mehlhorn (ed.). - Berlin, Heidelberg, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2011.
2. Hara, M. Levetiracetam / M. Hara, J.A. Balfour // CNS Drugs. - 1997. - V.7, № 2. - P.159–164.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-73-20020).*



## 2-АМИНООКСАЗОЛЫ КАК НОВЫЕ ДИЕНОФИЛЫ В РЕАКЦИИ АЗА-ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА С 5-ЦИАНО-1,2,4-ТРИАЗИНАМИ

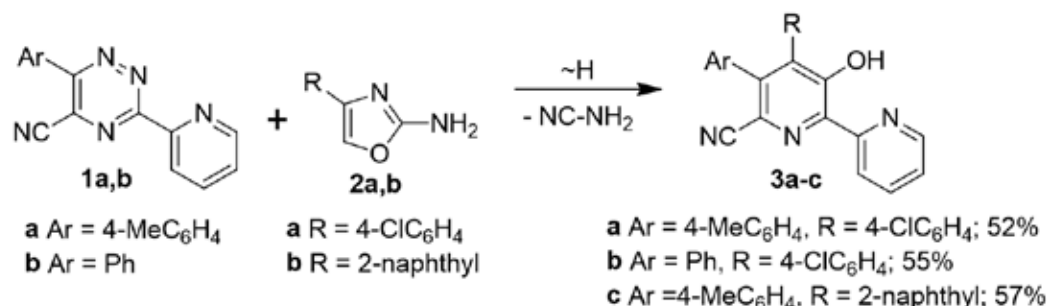
**Савчук М.И.,<sup>а,б</sup> Криночкин А.П.,<sup>а,б</sup> Копчук Д.С.,<sup>а,б</sup> Слепухин П.А.,<sup>а,б</sup> Ким Г.А.,<sup>а,б</sup> Штайц Я.К.,<sup>а</sup> Старновская Е.С.,<sup>а,б</sup> Рыбакова С.С.,<sup>а</sup> Зырянов Г.В.,<sup>а,б</sup> Чупахин О.Н.<sup>а,б</sup>**

<sup>а</sup> *Уральский Федеральный Университет, ул. Мира 19., 620002  
Екатеринбург, Россия*

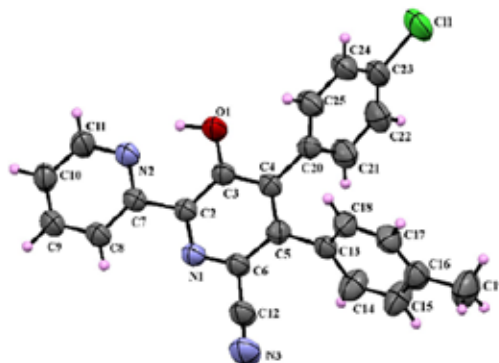
<sup>б</sup> *Институт Органического синтеза, Уральское отделение российской академии наук, ул. С. Ковалевской 3, 620041 Екатеринбург, Россия  
E-mail: maria.savchuk@urfu.ru*

Использование реакции аза-Дильса-Альдера в случае 1,2,4-триазинов является эффективным методом образования различным образом замещённых пиридинов. При этом нередко используется предварительная функционализация 1,2,4-триазинового ядра, например, замещением цианогруппы в С5 положении различными нуклеофилами. В случае ароматических анилинов эта реакция может быть осуществлена лишь в отсутствие растворителя.

В настоящей работе сообщается о необычной реакционной способности 2-амино-4-оксазолов в реакции с 5-циано-1,2,4-триазинами, проведённой в стандартных для таких реакций условиях отсутствия растворителя. Вместо ожидаемого замещения цианогруппы на остаток ароматического анилина последний вступил в реакцию циклоприсоединения, причём в качестве диенофила, что нехарактерно для аминоксазолов, обычно выступающих в таких реакциях в качестве диенов.



Результатом трансформации стало образование с выходами до 57% 3-гидрокси-2,2'-бипиридино, являющихся аналогами биологически активных соединений. Структура одного из продуктов **3a** была подтверждена данными РСА.



*Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента (грант № МК-320.2021.1.3).*

# ЭФФЕКТИВНЫЙ СИНТЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К 1,2,4-ТРИАЗИНАМ, ИМЕЮЩИМ В ПОЛОЖЕНИИ С5 ОСТАТКИ 2-(АМИНОФЕНИЛ)-1,3,4-ОКСАДИАЗОЛОВ

Савчук М.И.,<sup>a,b</sup> Криночкин А.П.,<sup>a,b</sup> Копчук Д.С.,<sup>a,b</sup> Словеснова Н.В.,<sup>a,b,c</sup> Ковалев И.С.,<sup>a</sup> Штайц Я.К.,<sup>a</sup> Старновская Е.С.,<sup>a,b</sup> Рыбакова С.С.,<sup>a</sup> Зырянов Г.В.,<sup>a,b</sup> Чупахин О.Н.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Уральский Федеральный Университет, ул. Мира 19., 620002, Екатеринбург, Россия

<sup>b</sup> Институт Органического синтеза, Уральское отделение российской академии наук, ул. С. Ковалевской 3, 620041 Екатеринбург, Россия

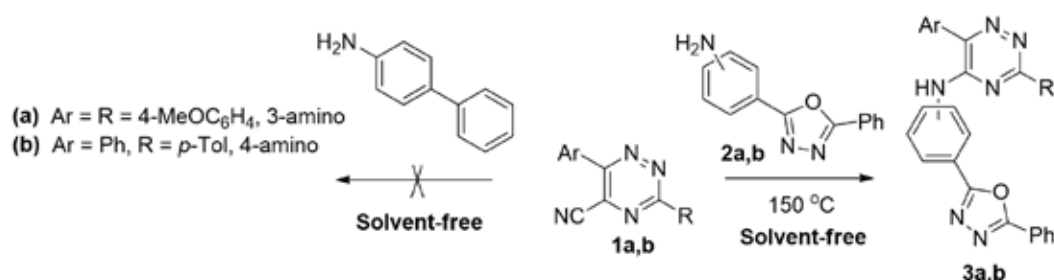
<sup>c</sup> Уральский Медицинский университет Минздрава России, 620028, Екатеринбург,

ул. Репина, 3, Тел.:(343) 214 86 71

E-mail: maria.savchuk@urfu.ru

Замещение цианогруппы в С5 положении 1,2,4-триазины является известным синтетическим приёмом для введения в его ядро различных нуклеофилов, таких как спирты, амины, С-Н активные соединения, и т.д.

В настоящей работе исследована возможность введения в состав ядра 1,2,4-триазины фрагментов 2-(аминофенил)-1,3,4-оксадиазолов, за счёт *in situ*-замещения цианогруппы в положении С5. Такие соединения интересны одновременным наличием 1,2,4-триазинового и 1,3,4-оксадиазольного ядер, известных своими фармакофорными свойствами.



В качестве исходных соединений нами были использованы ранее описанные 5-циано-1,2,4-триазины **1**. Их взаимодействие с 2-(аминофенил)-1,3,4-оксадиазолами **2** в условиях отсутствия растворителя позволяет получить соединения **3** с выходами до 59%. Реакция реализуется независимо от положения аминогруппы в составе ароматического заместителя в отличие от производных бифенилов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента (грант № МД-167.2021.1.3).

## ЭФФЕКТИВНЫЙ СИНТЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К 1,2,4-ТРИАЗИНАМ, ИМЕЮЩИМ В ПОЛОЖЕНИИ С5 ОСТАТКИ 3-АМИНОТИОФЕНА

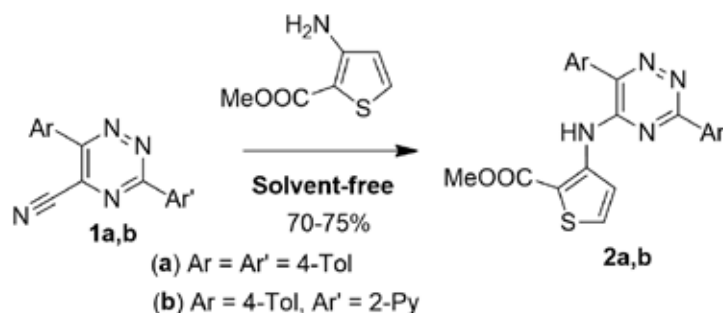
**Савчук М.И.**,<sup>a,b</sup> Криночкин А.П.,<sup>a,b</sup> Копчук Д.С.,<sup>a,b</sup> Штайц Я.К.,<sup>a</sup> Старновская Е.С.,<sup>a,b</sup>  
Рыбакова С.С.,<sup>a</sup> Зырянов Г.В.,<sup>a,b</sup> Чупахин О.Н.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Уральский Федеральный Университет, ул. Мира 19., 620002, Екатеринбург, Россия

<sup>b</sup> Институт Органического синтеза, Уральское отделение российской академии наук,  
ул. С. Ковалевской 3, 620041 Екатеринбург, Россия

E-mail: maria.savchuk@urfu.ru

1,2,4-Триазины с остатками аминотиофенов в положении С5 представляют интерес своей биологической активностью. Для их синтеза ранее было использовано  $S_N$ -*ipso* замещение атома хлора в С5 положении 1,2,4-триазина, а также Pd-катализируемое кросс-сочетание. В настоящей работе предложен новый метод введения остатка аминотиофена в С5 положение 1,2,4-триазина.



В качестве исходных соединений нами были использованы ранее описанные 5-циано-1,2,4-триазины **1**. Их взаимодействие с 3-амино-2-метоксикарбонилтиофеном в условиях отсутствия растворителя позволяет сформировать новую С-N связь и получить соединения **2** с выходами до 75% (в качестве метода очистки была использована колоночная хроматография с последующей перекристаллизацией из этанола).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента (грант № МД-167.2021.1.3).

# АЗИДОПРОИЗВОДНЫЕ РЯДА 2(5H)-ФУРАНОНА И 3-ПИРРОЛИН-2-ОНА: СИНТЕЗ, ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С НУКЛЕОФИЛАМИ И РЕАКЦИИ [3+2]-ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

Сайгитбаталова Е.Ш., Рамазанова К.Р., Шутилов И.Д., Исламов Д.Р.,  
Лодочникова О.А., Курбангалиева А.Р.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
420008, Казань, ул. Кремлевская 18,  
E-mail: ESSajgitbatalova@kpfu.ru*

Пятичленные кислород- и азотсодержащие циклы являются одними из самых распространенных фрагментов, входящих в состав множества природных и синтетических соединений, обладающих различными видами биологической активности. Среди наиболее доступных и удобных в плане функционализации и получения практически полезных соединений, несущих ненасыщенный  $\gamma$ -лактонный фрагмент, следует выделить 3,4-дигало-ген-5-гидрокси-2(5H)-фураноны. Данная работа посвящена разработке методов синтеза и изучению строения новых азот- и фосфорсодержащих производных на базе азидов ряда 2(5H)-фуранона и 3-пирролин-2-она.

В реакциях мукохлорной кислоты со спиртами получена серия 5-алкоксипроизводных 2(5H)-фуранона, обработка которых азидом натрия в ацетоне привела к образованию соответствующих азидофуранонов с группой  $N_3$  в 4 положении лактонного цикла. При взаимодействии азидов 2(5H)-фуранона с трифенилфосфином получены иминофосфораны, при восстановлении которых хлоридом олова выделены новые 5-алкокси-4-амино-3-хлор-2(5H)-фураноны. Показано, что удобным методом синтеза азидов ряда 3-пирролин-2-она является аммонолиз и аминирование 4-ази-до-5-алкокси-2(5H)-фуранонов.

Разработан метод синтеза новых гетероциклических систем, несущих фрагменты 1,2,3-триазола и ненасыщенного  $\gamma$ -лактона и / или  $\gamma$ -лактама, основанный на реакциях [3+2]-циклоприсоединения терминальных алкинов к азидам ряда фуранона или пирролинона в условиях катализа медью (I). Строение всех новых синтезированных соединений доказано методами спектроскопии ИК и ЯМР. Молекулярная и кристаллическая структура отдельных гетероциклов охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности № 0671-2020-0063.*

# ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ 5-(ГЕКС-5-ИН-1-ИЛ)-6-МЕТИЛУРАЦИЛА ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ, ДСК И ТЕМПЕРАТУРНО-РАЗРЕШЕННОЙ ИК СПЕКТРОСКОПИИ.

Сайфина А.Ф., Захарычев Д.В., Губайдуллин А.Т., Воронина Ю.К.,  
Сайфина Л.Ф., Лодочникова О.А.

*ИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН,  
420088, г. Казань, ул. Арбузова, 8  
asaifina@iopc.ru*

Урацил и его производные являются основными составляющими генетического материала и играют важнейшую роль в биологических процессах. Производные урацила обладают широким спектром биологической активности: антитиреодной, противоопухолевой, противовирусной, проявляют противогрибковую, противопротозойную активность. Как известно, одним из явлений способных оказывать влияние на биологическую активность веществ в кристаллической форме является полиморфизм.

В кристаллогидрате (2:1) 5-гексин-6-метилурацила за счет водородного связывания N-H...O типа наблюдается формирование замкнутого супрамолекулярного мотива, состоящих из трех centrosymmetric синтонов  $R_2^2(8)$  производного. С целью поиска новых полиморфных модификаций и исследования гетерогенных равновесий в кристаллической фазе нами было проведено термоаналитическое исследование кристаллогидрата исследуемого соединения методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), температурно-разрешенной ИК спектроскопии и рентгеновской дифракции. Установлено существование новых полиморфных модификаций данного соединения, обсуждаются особенности фазовых переходов полиморфов друг в друга.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект №17-13-01209)*

# НОВЫЕ ДИТОПНЫЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ ЛИГАНДЫ С ТЕРПИРИДИНОВЫМИ И ТИОГИДАНТОИНОВЫМИ ФРАГМЕНТАМИ И ИХ КОМПЛЕКСЫ С ХЛОРИДОМ МЕДИ (II)

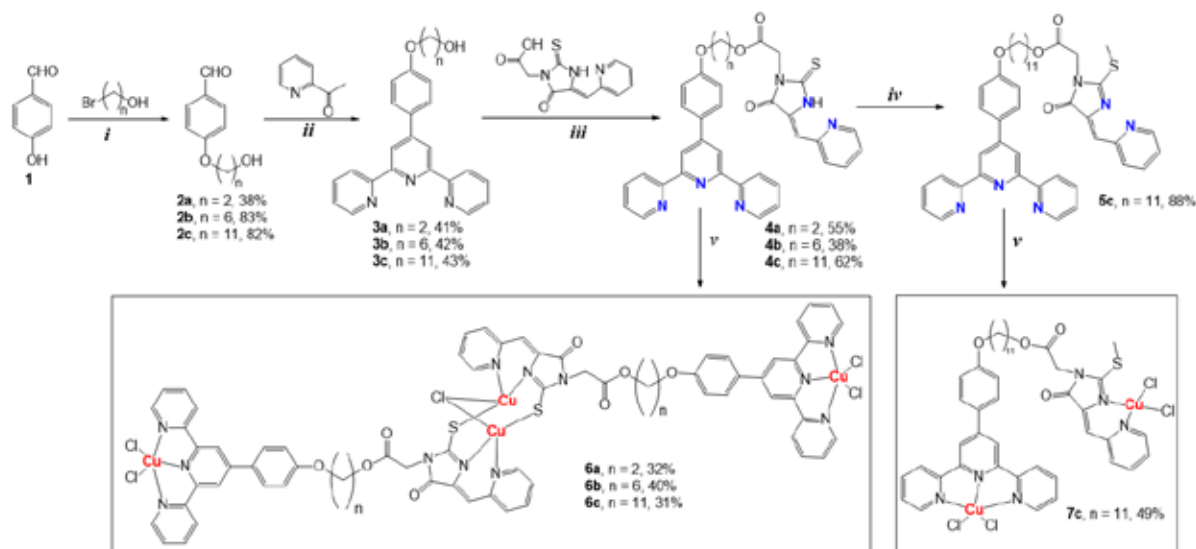
Салимова И.О., Березина А.В., Белоглазкина Е.К.

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Россия, Москва, Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

E-mail: ira.salimova.92@mail.ru

Гетеродитопные органические лиганды с двумя разделенными в пространстве сайтами связывания дают возможность получать на их основе как координационные соединения, в которых оба фрагмента лиганда, различающиеся по природе, координируют один и тот же ион металла, так и комплексы, в которых каждый из координирующих фрагментов связан с различными ионами.

В данной работе мы разработали синтетическую стратегию получения серии дитопных органических лигандов (L), содержащих два координирующих фрагмента различной природы – терпиридиновый и 5-пиридилметилден-2-тиоимидазолоновый, а также их медьсодержащих координационных соединений. Было показано, что в результате реакции комплексообразования в зависимости от типа исходного лиганда образуются комплексы двух структурных типов с брутто-формулами  $L_2Cu_2Cl_5$  или  $LCu_2Cl_4$ , структура которых установлена на основании комплекса физико-химических методов исследования.



i –  $K_2CO_3$ ,  $CH_3CN$ ,  $t^\circ C$ ; ii –  $KOH$ ,  $EtOH$ ,  $NH_3 \cdot H_2O$ ; iii – HBTU, DIPEA, DMF, iv –  $CH_3I$ ,  $K_2CO_3$ , DMF; v –  $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ ,  $BuOH/CH_2Cl_2$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-29-08007).

# НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ 4*H*-ТИЕНО[3,2-*b*]ПИРРОЛОВ

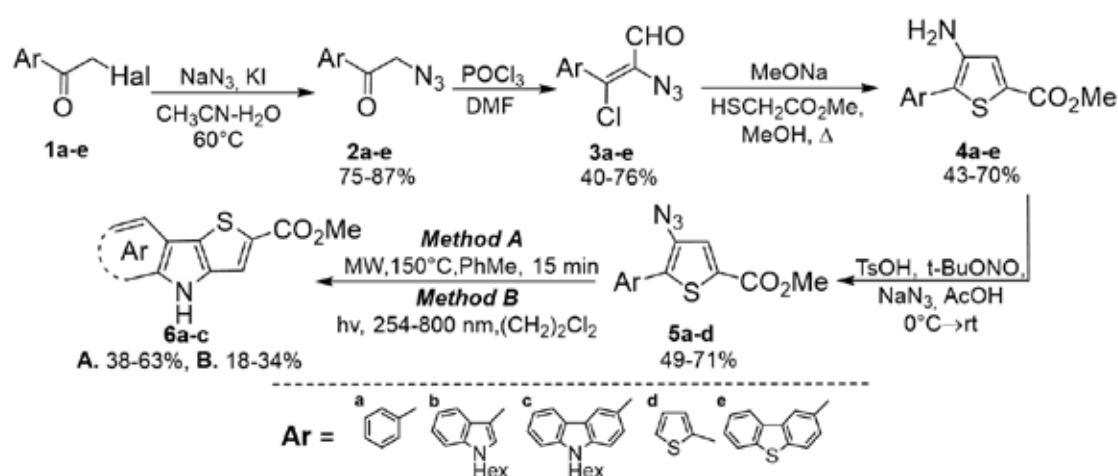
Самсоненко А.Л.,<sup>а</sup> Костюченко А.С.,<sup>а,б</sup> Фисюк А.С.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>ФГБОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского»,  
 644077, Омск, пр. Мира, 55а  
 e-mail: SamsonenkoAL@omsu.ru

<sup>б</sup>ФГБОУ ВО «Омский государственный технический университет», 644050, Омск, пр. Мира, 11

Соединения ряда 4*H*-тиено[3,2-*b*]пирролов обладают уникальными оптическими и электрохимическими свойствами, что делает их перспективными структурными блоками для органических полупроводников<sup>1,2</sup>.

Используя ранее предложенный нами метод<sup>3</sup>, получена серия 4-арил-5-аминотиофенов **4**, которые при взаимодействии с *t*-BuONO, *p*-TsOH и NaN<sub>3</sub> образуют азидопроизводные **5** с хорошими выходами.



Разработан новый подход к синтезу 4*H*-тиено[3,2-*b*]пирролов **6**, основанный на реакции циклизации азидов **5** в условиях микроволнового излучения, а также под действием УФ (254 нм, 365 нм) и видимого света (400-800 нм).

## Литература

- Zhang H. Fan J., Iqbal Z., Kuang D. B., Wang L., Meier H., Cao, D. *Org. Electron.*, 2013, **8**, 2071.
- Liu J. Zhang R., Sauv e G., Kowalewski T., McCullough R. D. *J. Am. Chem. Soc.*, 2008, **39**, 13167.
- A.S. Kostyuchenko, A.M. Averkov, A.S. Fisyuk. *Org. Lett.*, 2014, **7**, 1833.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №20-73-10043.

# СИНТЕЗ 2- И 2,3-ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРАЗОЛО[1,5-А][1,10]ФЕНАНТРОЛИНОВ

Санникова В.А., Филиппов И.Р., Кармацких О.Ю., Панфилов М.А., Воробьев А.Ю.

Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова СО РАН,  
630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева 9,  
e-mail: vika6433@gmail.com

1,10-Фенантролин и его производные активно используются в дизайне лигандов для координационной химии, в том числе для создания новых координационных люминесцентных и полимерных материалов, флуоресцентных хемосенсоров ионов металлов и органических молекул, а также в качестве хиральных катализаторов. Разнообразные применения производных 1,10-фенантролина обуславливают актуальность разработки методов модификации данного гетероциклического остова.

В данной работе было изучено взаимодействие 1,10-фенантролин-*N*-имина, который легко генерируется действием основания на соответствующую *N*-аминофенантролиниевую соль, с акцепторными алкенами и алкенами, в результате чего получена новая гетероциклическая система – пиразоло[1,5-а][1,10]фенантролин.

Схема 1



Взаимодействием *N*-амино-1,10-фенантролиний мезитиленсульфоната с акцепторнозамещенными алкенами в системе  $\text{K}_2\text{CO}_3$ -ДМСО получены 3- и 2,3-замещенные пиразоло[1,5-а][1,10]фенантролины. В реакцию вступает широкий круг алкенов.



# РЕАКЦИИ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ В РЯДУ ОКСАФОСФОРИНИНОВ – ПУТЬ К СОЗДАНИЮ НОВЫХ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

**Сенникова В.В.,<sup>а</sup> Садыкова Ю.М.,<sup>б</sup> Воронина Ю.К.,<sup>в</sup> Бурилов А.Р.<sup>б</sup>**

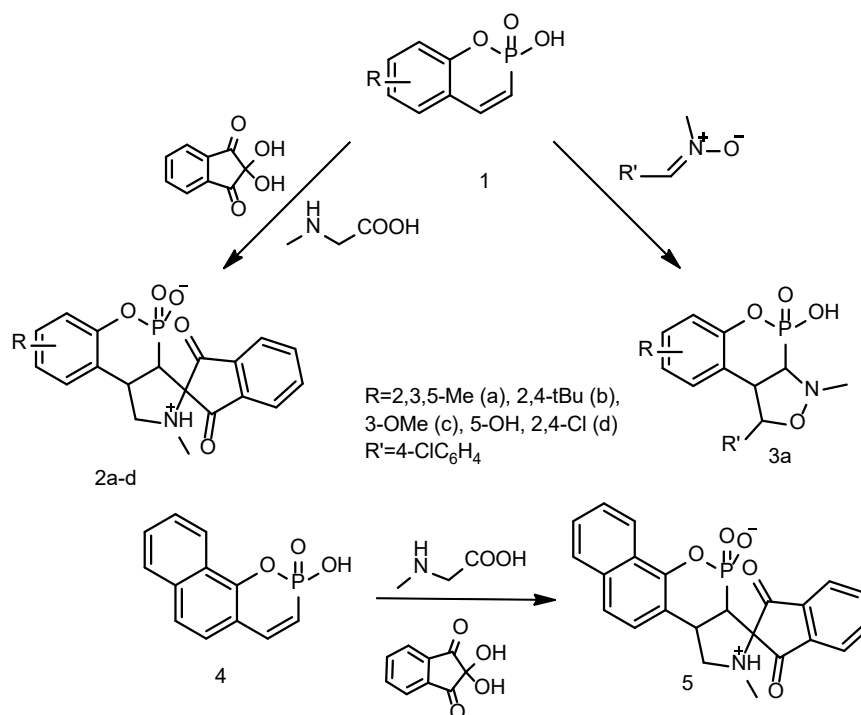
<sup>а</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
420015, Россия, Казань, Карла Маркса 64,  
e-mail: sennikovalera@gmail.com

<sup>б</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ КазНЦ РАН,  
420088, Россия, Казань, Академика Арбузова 8

<sup>в</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,  
119991, Россия, Москва, Ленинский проспект 31

Реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения широко распространены в органической химии благодаря возможности существенного усложнения структуры соединений всего за одну синтетическую стадию. Однако в литературе не так много данных об использовании фосфорсодержащих непредельных гетероциклов в качестве диполярофила.<sup>1</sup>

Данная работа посвящена получению и исследованию свойств полициклических каркасных соединений фосфора.



## Литература

1. Singh M.S., Chowdhury S., Koley S. Tetrahedron, 2016, 72, 1603-1644.

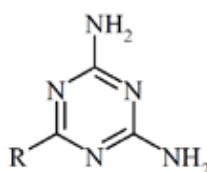
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 20-03-00118

# СТРОЕНИЕ И ОСНОВНОСТЬ 1,3,5-ТРИАЗИН-2,4-ДИАМИНОВ

**Сиднева В.В., Красовская Г.Г., Данилова А.С., Кофанов Е.Р.**

*Институт химии и химической технологии,  
Ярославский государственный технический университет,  
150023, г. Ярославль, Московский пр-т, 88  
sidneva-vera@mail.ru*

1,3,5-Триазин-2,4-диамины применяются как компоненты фармацевтических препаратов, регулирующих скорость регенерации тканей, противоопухолевых препаратов, а также используются в качестве мономеров для получения сверхразветвленных полимеров<sup>1</sup>.



Нами был синтезирован ряд 1,3,5-триазин-2,4-диаминов. Для полученных соединений определены константы кислотности и предпринята попытка установления зависимости между  $pK_a(BH^+)$  и параметрами молекул (таблица 1). Параметры молекул рассчитывали методом DFT программный пакет GAUSSIAN 09. Геометрия всех триазинов была оптимизирована на уровне B3LYP/6-31G\* без каких-либо конкретных ограничений симметрии. Проверка частот колебаний для этих геометрий показывает, что нет отрицательных значений частот колебаний, что указывает на достижение минимума на поверхности потенциальной энергии. Для учета влияния растворителя ( $CH_3COOH$ ) использовалась Polarizable Continuum Model (PCM).

Таблица 1. Константы кислотности ( $pK_a(BH^+)$ ), разница энергий протонированной и непротонированной форм молекул ( $E(RB3LYP)H^+ - E(RB3LYP)$ ), ккал/моль, энергия Гиббса ( $\Delta G$ , а,е).

R	$pK_a(BH^+)$	$E(RB3LYP)H^+ - E(RB3LYP)$ , ккал/моль	$\Delta G$ , а,е,
$H_2N-$	3,67	257,079	-0,395
$C_6H_5-$	2,89	253,946	-0,390
$4'-CH_3O-C_6H_4-$	2,77	255,087	-0,393
$4'-CH_3-C_6H_4-$	2,59	254,616	-0,391
$3'-NO_2-C_6H_4-$	2,42	251,329	-0,387
$4'-Br-C_6H_4-$	2,03	252,879	-0,389
$4'-NO_2-C_6H_4-$	1,59	250,614	-0,384

## Литература

1. Gao C., Yan D. *Prog. Polym. Sci.*, 2004, **29**, 183.

# РЕАКЦИИ ПРЯМОГО С–Н-ТРИФТОРМЕТИЛИРОВАНИЯ АЗОЛОАЗИНОВ В ДИЗАЙНЕ НОВЫХ СТРУКТУРНЫХ АНАЛОГОВ ТРИАЗАВИРИНА®

**Силаева А.И.,<sup>a</sup> Акулов А.А.,<sup>a</sup> Вараксин М.В.,<sup>a,b</sup> Дрокин Р.А.,<sup>a</sup> Федотов В.В.,<sup>a</sup> Русинов В.Л.,<sup>a,b</sup> Чарушин В.Н.,<sup>a,b</sup> Чупахин О.Н.<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19  
e-mail: silaevanastya11@gmail.com

<sup>b</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,  
620990, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22

Азолазины представляют класс химических соединений, известный своей активностью в отношении вирусных инфекций.<sup>1</sup> Одним из наиболее перспективных и, в то же время, малоизученных подходов к модификации таких соединений является стратегия прямой C(sp<sup>2</sup>)-H-функционализации азолазинового каркаса. В частности, особый интерес связан с разработкой эффективных методов введения в молекулу азолазина фармакофорного трифторметильного заместителя.

Было установлено, что триазолотриазины **1** (Схема 1), представляющие собой структурные аналоги противовирусного препарата Триазавирин®, способны вступать в реакции прямого трифторметилирования с трифторметансульфинатом натрия **2**, при этом в качестве активатора процесса может быть использован *tert*-бутилгидропероксид. В результате были получены производные **3**, чье строение подтверждено методами 2D ЯМР- и масс-спектрологии.

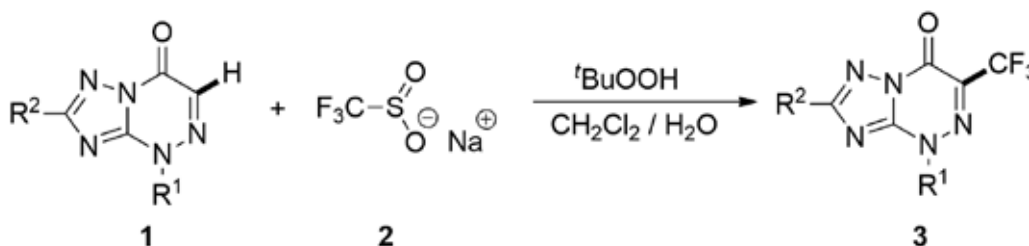


Схема 1. Прямое С–Н-трифторметилирование азолазинов.

В настоящее время для полученных соединений **3** планируется проведение *in vitro*- и *in silico*-исследований в отношении возбудителей вирусных инфекций, в том числе в отношении вируса SARS-CoV2.

## Литература

1. Rusinov V.L., Charushin V.N., Chupakhin O.N. *Russ. Chem. Bull.*, 2018, **67**, 573.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-53-55003.

# ПРЕДШЕСТВЕННИКИ ДЛЯ СОЗДАНИЯ рН-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ФЛУОРОФОРОВ НА ОСНОВЕ 6,7-ДИГИДРО-1H-1,4-ДИАЗЕПИНОВ

**Скворцов И.А.,<sup>а</sup> Фазлыева А.М.,<sup>а</sup> Сомов Н.В.,<sup>б</sup> Ходов И.А.,<sup>в</sup> Стужин П.А.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup> НИИ Макрогетероциклических соединений,  
Ивановский государственный химико-технологический университет,  
153000, Иваново, проспект Шереметевский, 7  
e-mail: ivanskvortsov@mail.ru

<sup>б</sup> Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет  
им. Н.И. Лобачевского, 603022, Нижний Новгород, проспект Гагарина, 23

<sup>в</sup> Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН,  
153045, Иваново, улица Академическая, 1

Среди 1,4-дiazепин 2,3-дикарбонитрилов<sup>1</sup> – предшественников для получения порфиразиноидов, известны несколько форм 1,4-дiazепиновых колец. В частности, различают 6H-, 6,7-дигидро-1H- и 4,5,6,7-тетрагидро-1H-1,4-дiazепиновые кольца. Структура и физико-химические свойства 2,3-дикарбонитрилов и порфиразинов на основе данных гетероциклов существенно отличаются. До настоящего времени были широко изучены лишь макроциклы и нитрилы с 6H-<sup>2</sup> и 4,5,6,7-тетрагидро-1H-1,4-дiazепиновыми фрагментами<sup>3</sup>.

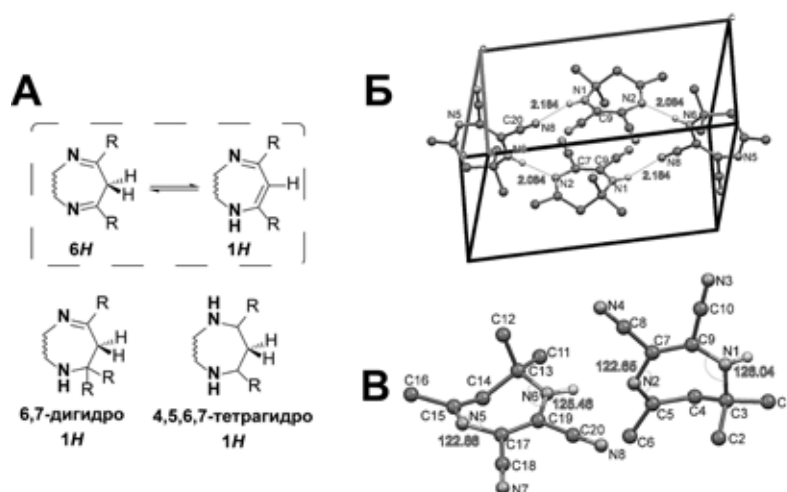


Рисунок 1. А-различные формы diaзепиновых колец,  
Б-упаковка в элементарной ячейке  $[Me_3Dz(CN)_2]$  и его молекулярная структура-В

В настоящей работе мы впервые представляем результаты рентгеноструктурного анализа и исследования кислотно-основных и окислительно-восстановительных свойств 5,7,7-триметил-6,7-дигидро-1H-1,4-дiazепин 2,3-дикарбонитрила  $[Me_3Dz(CN)_2]$  и порфиразина на его основе, проявляющий рН-чувствительность за счет переключаемого эффекта ICT (внутримолекулярного переноса заряда)<sup>4</sup>.

## Литература

1. Begland R.W. et al., *J. Org. Chem.*, **1974**.
2. Donzello M.P. et al. *Eur. J. Inorg. Chem.*, **1998**.
3. Baum S.M. et al. *J. Org. Chem.* **2003**, N. 5.
4. Skvortsov I.A., Stuzhin P.A. et al., *New J. Chem.* **2020**.

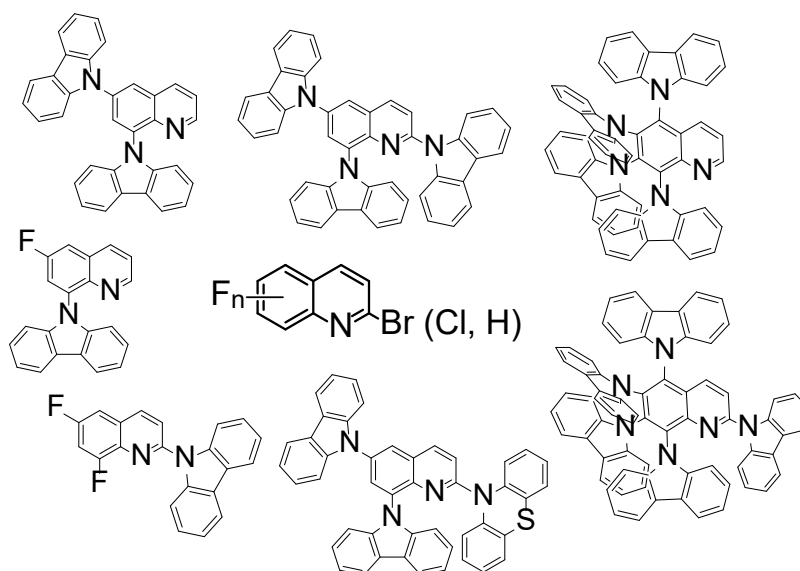
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-33-90276.

# НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ OLED НА ОСНОВЕ ФТОРИРОВАННЫХ ХИНОЛИНОВ

Сколяпова А.Д., Мостович Е.А.

Новосибирский государственный университет,  
 630090, Новосибирск, ул. Пирогова 1,  
 e-mail: sad.orellab@gmail.com

В последнее время интерес к хинолинам, как термостабильным акцепторным блокам для создания материалов для органических светоизлучающих устройств (OLED) значительно возрос<sup>1,2</sup>. Фторированные хинолины являются удобными исходными соединениями, позволяя получать как фторсодержащие молекулы донорно-акцепторного типа, так и нефторированные ансамбли, содержащие три и более донорных блока. Тонкая настройка оптических и электронных свойств материала достигается путем варьирования количества и расположения атомов фтора и донорных блоков, а также за счет смены типа донора.



Полученные соединения обладают интенсивной фотолуминесценцией (полосы эмиссии от 415 до 580 нм, квантовые выходы от 40% в кристаллах и от 85% в растворе ТГФ) и выраженным сольватохромизмом. В дальнейшем эти материалы будут использованы в изготовлении OLED.

## Литература

1. Sych G. *et al. J. Phys. Chem. C*, 2019, **123**, 4, 2386–2397.
2. Shao X. *et al. Dyes Pigm.*, 2021, **188**, 109198

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ проект FSUS-2020-0036.

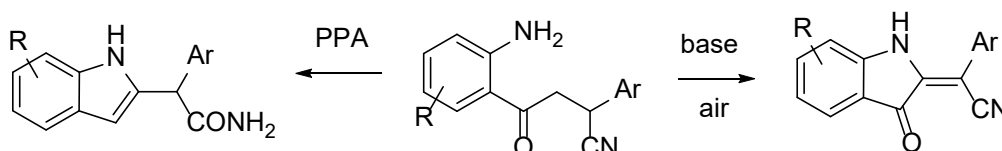
# ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ЦИКЛИЗАЦИЯ 4-(2-АМИНОФЕНИЛ)-4-ОКСОБУТИРОНИТРИЛОВ В ПРИСУТСТВИИ ОСНОВАНИЙ

[Скоморохов А.А.](#), Аксенов Н.А., Аксенов А.В., Аксенов Д.А., Притыко Л.А., Аксенова Д.С.

Северо-Кавказский федеральный университет, 355017, г. Ставрополь, ул. Пушкина 1,  
e-mail: [naksenov@ncfu.ru](mailto:naksenov@ncfu.ru)

Халконы широко представлены в природных объектах, являясь основой многих природных красителей (название от греческого *χαλκός* – медь) и биологически активных соединений<sup>1</sup>. Нельзя обойти стороной их высокую доступность, что делает синтетические стратегии, основанные на данных структурах необычайно привлекательными и, как следствие, широко представленными в литературе.

Такой интерес к химии халконов обуславливает большую проработанность направления, изученность всех очевидных маршрутов. Тем не менее, химия 4-оксобутиронитрилов - аддуктов Михаэля с синильной кислотой оказалась незаслуженно слабо изученной. Показанный нами ранее эффективный метод синтеза недоступных 2-(индол-2-ил)ацетамидов<sup>2</sup> заставил пристальней присмотреться к 4-(2-аминофенил)-4-оксобутиронитрилам. Оказалось, что в то время как в присутствии полифосфорной кислоты происходит перегруппировка в 2-(индол-2-ил)ацетамиды<sup>2</sup>, воздействие оснований в атмосфере кислорода приводит к другому классу ценных соединений - 2-(3-оксоиндолин-2-илиден)ацетонитрилам.



## Литература

1. Zhuang C., Zhang W., Sheng C., Zhang W., Xing C., Miao Z. *Chem. Rev.*, 2017, **117**, 7762.
2. Aksenov N.A., Aksenov D.A., Arutiunov N.A., Aksенова D.S., Aksenov A.V., Rubin M. *RSC Adv.*, 2020, **10**, 18440.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-10029, <https://rscf.ru/project/21-73-10029/>.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ 2,2'-БИПИРИДИЛ-ЗАМЕЩЕННЫХ 2-ФТОРФЕНИЛ-1,3,4-ОКСАДИАЗОЛОВ IN-VITRO

**Словеснова Н.В.**,<sup>1,2,3</sup> Тания О.С.,<sup>2,3</sup> Минин А.С.,<sup>3,4</sup> Колчук Д.С.,<sup>2,3</sup> Штайц Я.К.,<sup>2</sup> Криночкин А.П.,<sup>2,3</sup> Ковалев И.С.,<sup>2</sup> Носова Э.В.,<sup>2,3</sup> Зырянов Г.В.,<sup>2,3</sup> Петров А.Ю.<sup>1</sup>

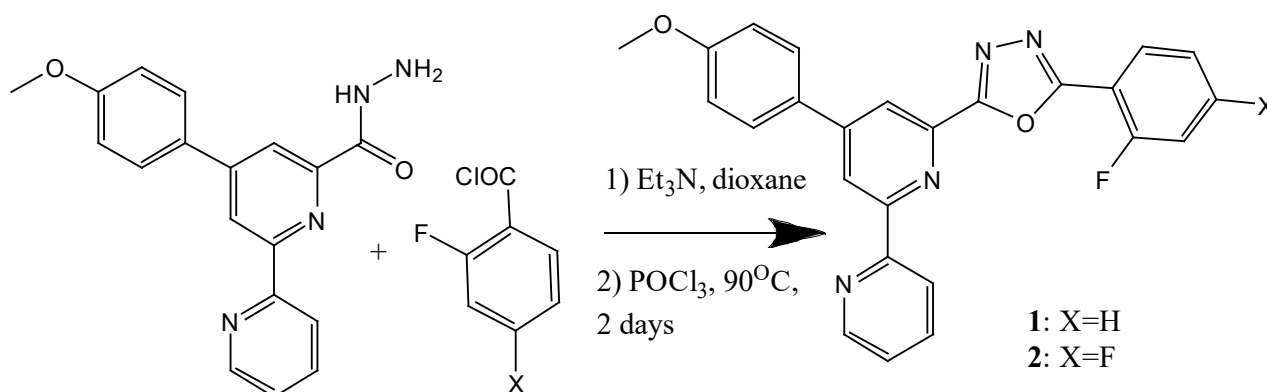
<sup>1</sup>Уральский государственный медицинский университет,  
620028, РФ, Екатеринбург, ул. Репина, 3  
e-mail: saarge@mail.ru

<sup>2</sup>Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,  
620002, РФ, Екатеринбург, ул. Мира, 19

<sup>3</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского  
Уральского отделения Российской академии наук, 62013, РФ, Екатеринбург,  
ул. Софьи Ковалевской, дом 22/20

<sup>4</sup>Институт иммунологии и физиологии Уральского отделения Российской академии наук,  
620049, РФ, Екатеринбург ул. Первомайская, 106

1,3,4-Оксадиазольный и 2,2'-бипиридиновый фрагменты встречается во многих лекарственных веществах и флуоресцентных красителях<sup>1</sup>. Нами были синтезированы 2,2'-бипиридил- и 2-фторфенил-замещенные 1,3,4-оксадиазолы **1-2**, как новые пуш-пульные флуорофоры:



При исследовании возможностей окрашивания/визуализации культур клеток *Vero in-vitro* действием флуорофора **1** методом конфокальной микроскопии было обнаружено батохромное смещение максимумов фотолюминесценции. Нами было предположено, что имеет место *in-situ*-замещение атомов фтора в положениях 1' и/или 4' фенильного заместителя (флуорофоров **1-2**) под действием культур данных клеток.

Это предположение было косвенно подтверждено модельными экспериментами, когда обработка флуорофора **1** морфолином в отсутствие растворителя приводила, по данным <sup>1</sup>H ЯМР, к смеси продукта *in-situ*-замещения атома фтора фрагментом морфолина, а также исходного соединения.

## Литература

1. Cesca E. C. et al. *Electrochimica Acta*, 2020, 350, 136350.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 19-73-10144).

# СПОСОБЫ КООРДИНАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАЗОЛА В КОМПЛЕКСАХ ЭНДОГЕННЫХ МЕТАЛЛОВ

Смирнова К.С.,<sup>а</sup> Еремина Ю.А.,<sup>а,б</sup> Ермакова Е.А.<sup>а,б,в</sup>, Лидер Е.В.<sup>а,в</sup>

<sup>а</sup> Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,  
630090, Новосибирск, просп. ак. Лаврентьева, 3

<sup>б</sup> Научно-исследовательский институт молекулярной биологии и биофизики –  
структурное подразделение ФИЦ ФТМ, 630117, Новосибирск, ул. Тимакова, 2/12

<sup>в</sup> Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 1  
e-mail: smirnova\_ksenya96@mail.ru

Синтез комплексов эндогенных металлов с производными тетразола является актуальным направлением биохимии, в том числе благодаря тому, что эти соединения проявляют ярко выраженную цитотоксическую активность. Помимо этого, комплексы на основе производных тетразола интересны с точки зрения фундаментальной координационной химии своим разнообразием получаемых структур. Наличие четырех донорных атомов азота позволяет данным гетероциклам проявлять различные способы координации.

В данной работе исследовались координационные возможности производных тетразола на примере полученных смешаннолигандных комплексных соединений эндогенных металлов (медь(II), цинк(II), марганец(II), кобальт(II) и др.). С помощью рентгеноструктурного анализа установлены структуры серии комплексов, в которых производные тетразола проявляют несколько способов координации: монодентатную, бидентатно-мостиковую различными атомами азота, а также тридентатную (рис. 1). Вследствие многообразия способов координации, получены моно-, би-, трехъядерные соединения и полимерные цепочки.

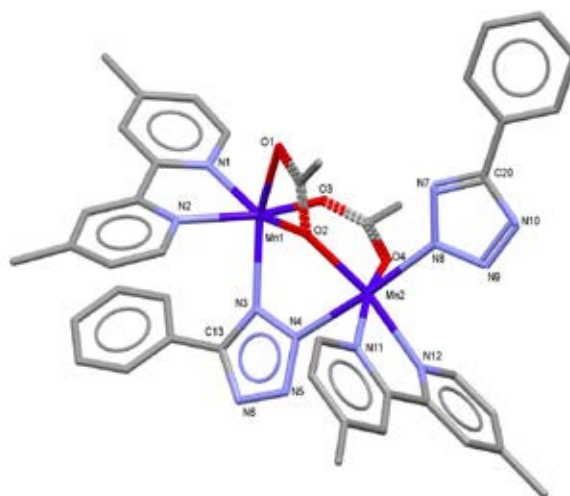


Рисунок 1. Строение комплекса  $[Mn_2(dmbyru)_2(5-ftz)_2(OAc)_2]$ , где *dmbyru* – 4,4'-диметил-2,2'-бипиридин, *5-ftz* – 5-фенилтетразол.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 20-73-10207).



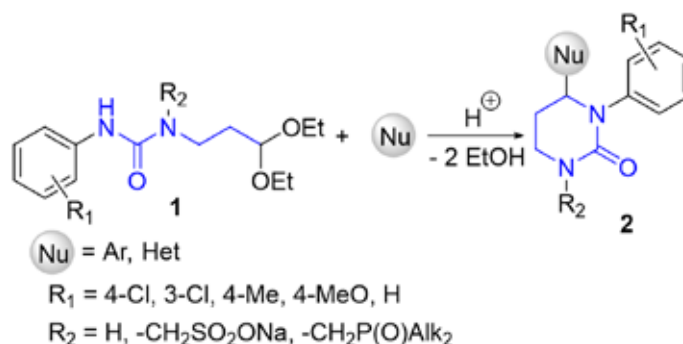
# НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА ФУНКЦИОналиЗИРОВАННЫХ ТЕТРАГИДРОПИРИМИДИН-2(1H)-ОНОВ, НА ОСНОВЕ РЕАКЦИИ 1-(3,3-ДИЭТОКСИПРОПИЛ)МОЧЕВИН С С-НУКЛЕОФИЛАМИ

**Смолобочкин А.В., Яхшиликowa Л.Ж., Газизов А.С., Бурилов А.Р., Пудовик М.А.**

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,  
420088, Казань, Академика Арбузова 8  
smolobochkinav@mail.ru*

Замещённые мочевины нашли широкое применение в медицине, сельском хозяйстве и технике. Особенно интересны производные циклической мочевины – тетрагидропиримидин-2(1H)-оны, поскольку обладают различной фармакологической активностью. Согласно литературным данным, представители этого класса гетероциклических соединений являются ингибиторами дигидрооротазы, протеазы ВИЧ-1 и топоизомеразы I.

Предложенный метод основан на кислотно-катализируемой реакции производных 1-(3,3-диэтоксипропил)мочевин **1** с различными С-нуклеофилами. К преимуществам метода можно отнести высокий выход целевых соединений **2**, мягкие условия реакции и отсутствие необходимости использования дорогостоящих реактивов.



*Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 21-73-20020).*

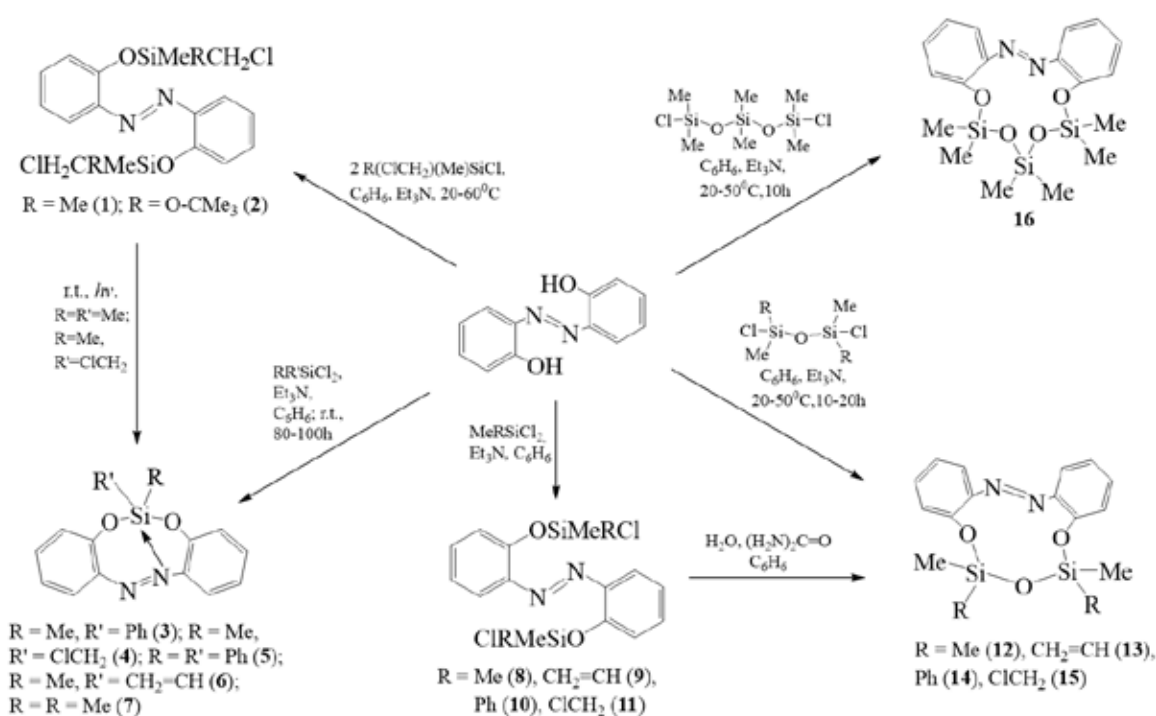
# КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИЕ ГЕТЕРОЦИКЛЫ НА ОСНОВЕ 2,2'-ДИГИДРОКСИАЗОБЕНЗОЛА

Солдатенко А.С., Стерхова И.В., Лазарева Н.Ф.

Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН, ул. Фаворского, д.1, Иркутск, 664033, Россия, e-mail: soldatenko@iriioch.irk.ru

Разработан метод получения новых фоточувствительных кремнийорганических гетероциклических и линейных соединений на основе реакций 2,2'-дигидроксиазобензола с хлорсиланами или хлорсилоксанами. Реакции протекают в среде бензола с добавлением триэтиламина как акцептора хлороводорода (схема 1). Линейные соединения **1** и **2** легко циклизуются при дневном свете в соединения с пентакоординированным атомом кремния **7** и **4**.

Схема 1.



Строение всех соединений доказано методами ИК, ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{29}\text{Si}$  и РСА.

Вследствие уникального сочетания в одной молекуле фотоактивного азобензольного фрагмента и полифункциональной кремниевой группы синтезированные соединения представляют интерес для теоретической и структурной химии, а также являются перспективными синтонами в органической, медицинской химии и химии материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-03-00143) с использованием аналитического оборудования Байкальского центра коллективного пользования СО РАН.

# КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ КЛЕТКИ, НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ (ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНОВ В КОНФИГУРАЦИИ КОНУС

**Соловьёва С.Е.**,<sup>а,б</sup> Князева М.В.<sup>а</sup>, Овсянников А.С.<sup>а,б</sup>, Дороватовский П.В.<sup>в</sup>, Антипин И.С.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, 420088, Казань, ул. Арбузова, д. 8.

e-mail: evgersol@yandex.ru

<sup>б</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008, Казань, ул. Кремлевская, д. 29/1

<sup>в</sup>НИИ «Курчатовский институт», 123182 Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1,

(Тиа)каликс[4]арены в конфигурациях конус являются перспективными полидентатными лигандами для образования кластерных металлокомплексов и/или протяженных металл-органических структур. Контроль за самосборкой этих соединений при помощи рационального дизайна структуры макроцикла в сочетании с использованием органических со-лигандов может привести к созданию новых кристаллических функциональных материалов<sup>1,2</sup>.

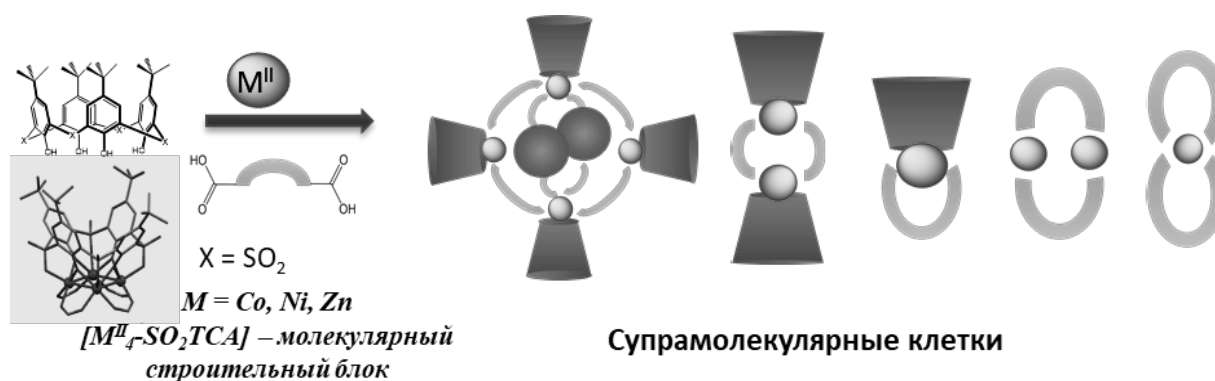


Схема 1.

В данном сообщении обсуждаются кристаллические супрамолекулярные клетки, образующиеся при взаимодействии производных (тиа)каликс[4]аренов в конфигурациях конус с катионами *d*-металлов, их структура и свойства<sup>3,4</sup> (Схема 1).

## Литература

1. Bi. Y., Du S., Liao W., *CoordChemRev.*, **2014**, 276, 61-72.
2. Ovsyannikov A.S., Solovieva S.E., Antipin I.S., Ferlay S. *CoordChemRev.*, **2017**, 352, 51-186.
3. Kniازهva M.V., Ovsyannikov A.S., Islamov D.R., Samigullina A.I., Gubaidullin A.T., Solovieva S.E., Antipin I.S., Ferlay S. *Crystals*, **2020**, 10, 364.
4. Kniازهva M.V., Ovsyannikov A.S., Islamov D.R., Samigullina A.I., Gubaidullin A.T., Dorovatovskii P.V., Solovieva S.E., Antipin I.S., Ferlay S. *CrystEngComm*, **2020**, 22, 7693-7703

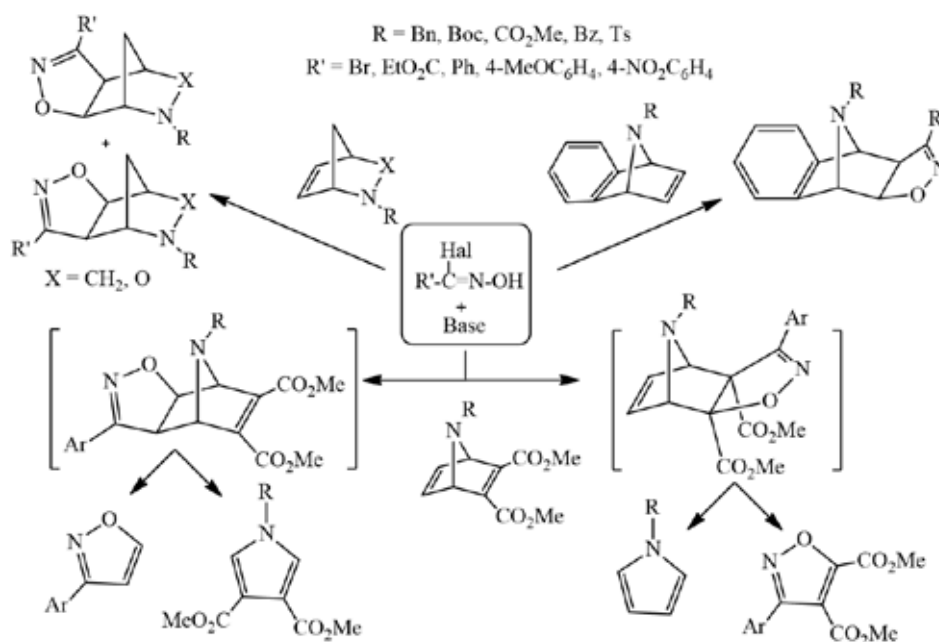
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-20035.

# ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ АЗАНОРБОРНЕНА В РЕАКЦИЯХ С НИТРИЛОКСИДАМИ

Солодовникова Т.А., Якупова Л.Р., Гаврилова А.Ю., Зык Н.В.

*Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова,  
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр.3,  
e-mail: ts15.01.1995@yandex.ru*

Присоединение нитрилоксидов по двойной C=C-связи приводит к образованию изоксазолинового кольца, являющегося скрытым эквивалентом некоторых функциональных групп<sup>1</sup>, при этом отдельный интерес представляет изучение поведения в этих реакциях производных азанорборнена, так как введение в бициклическую структуру гетероатома расширяет возможности модификации каркаса. На примере взаимодействия этоксикарбонил-, бром- и арилнитрилоксидов с производными 2-азанорборнена и 7-азабезноборборнадиена (с электроноакцепторными заместителями на атоме азота) было показано, что в результате реакции образуются продукты 1,3-диполярного присоединения с *экзо*-расположением изоксазолинового кольца.



7-Азанорборнадиены также вступают в реакцию 1,3-диполярного циклоприсоединения, но быстро подвергаются ретро-реакции Дильса-Альдера, что приводит к образованию пирролов и изоксазолов.

## Литература

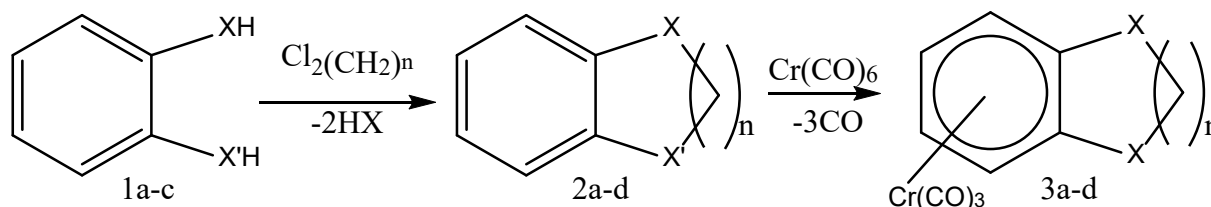
1. Литвиновская Р.П., Хрипач В.А. *Успехи химии*, 2001, **70**, 464.

# СИНТЕЗ НОВЫХ $\eta^6$ -(АРЕН)ХРОМТРИКАРБОНИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Суровцев Д.Ю., Колесова А.С., Артемов А.Н., Сазонова Е.В.**

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Российская Федерация, 603950  
 Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23, корп.5  
 e-mail: ddeniss14@mail.ru*

Среди веществ, обладающих фармакологическими и биологически активными свойствами, особое место занимают гетероциклические 1,3- и 1,4-производные, содержащие пяти- и шестичленные циклы. Ввиду наличия в этих соединениях нуклеофильных гетероатомов, прямая координация их с  $\text{Cr}(\text{CO})_6$  или с его производными невозможна. Нами показано, что защитой может служить алкилирование орто-функционально замещенных бензолов, таких как пирокатехин (1a), 2-аминофенол (1b) и орто-фенилендиамин (1c). Алкилирующими агентами служили простейшие дигалоидные органические соединения. Полученные соединения далее вступали в реакцию с  $\text{Cr}(\text{CO})_6$  или  $(\text{NH}_3)_3\text{Cr}(\text{CO})_3$  с образованием  $\pi$ -комплексов.



Соединение	n	X	X'	$T_{\text{пл}}$ (°C)	Выход (%)
2a	1	O	O	Жидк.	38
2b	2	O	O	Жидк.	48
2c	2	O	NH	35-37	46
2d	2	NH	NH	96	33
3a	1	O	O	105	36,5
3b	2	O	O	125	41,5
3c	2	O	NH	115-117	53
3d	2	NH	NH	54-59	62

Реакции проходят в мягких условиях. Полученные соединения были охарактеризованы с помощью физико-химических методов анализа.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 0729-2020-0039.*

# ВЛИЯНИЕ ПОЛОЖЕНИЯ ФТОР-ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ ФТАЛОЦИАНИНОВ МЕТАЛЛОВ

Сухих А.С., Бонегардт Д.В., Клямер Д.Д., Басова Т.В.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского Отделения Российской Академии  
Наук, 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева 3  
e-mail: a\_sukhikh@niic.nsc.ru*

Фталоцианины металлов обладают уникальными физико-химическими свойствами, которые определяют широкую область их практического применения в качестве активных слоев электронных устройств, таких как солнечные батареи, органические полевые транзисторы и химические сенсоры. Известно, что добавление различных периферийных атомов-заместителей во фталоцианиновое кольцо позволяет изменять электрофизические, фотофизические и сенсорные свойства комплекса. Среди большого разнообразия заместителей фторсодержащие заместители привлекают внимание исследователей благодаря своему сильному электроноакцепторному характеру. Введение фтор-заместителей приводит к изменению уровня проводимости и величины сенсорного отклика, а в предельном случае при замене всех шестнадцати периферийных атомов водорода на атомы фтора позволяет изменить тип проводимости фталоцианинового комплекса с р-типа на п-тип.

Вместе с этим, стоит учитывать что все эти эффекты могут наблюдаться не только из-за изменения электронной плотности сопряженного макроцикла, но и из-за изменения характера молекулярной упаковки и межмолекулярных контактов. Поскольку в случае тетра-фторзамещенных фталоцианинов фтор-заместители могут вводиться в различных (периферийных и непериферийных) позициях, сравнение кристаллической структуры таких комплексов позволяет оценить степень влияния межмолекулярных контактов на их физические свойства при одинаковом количестве введенных фтор-заместителей.

В данной работе были изучены кристаллические структуры ряда тетра-фторзамещенных фталоцианинов  $M\text{PcF}_4$  ( $M = \text{Co}, \text{Cu}, \text{Zn}, \text{Pd}, \text{VO}, \text{TiO}, \text{Pb}$ ). Было показано, что введение фтор-заместителей в непериферийные положения приводит к значительным изменениям в характере межмолекулярных взаимодействий и оказывает заметное влияние на кристалличность фторзамещенных фталоцианинов по сравнению с периферийно замещенными аналогами.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 20-73-00080.*

## 3-(ГЕТ)АРИЛАМИНОМЕТИЛИДЕН-3H-ФУРАН-2-ОНЫ. СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ, ПЕРЕГРУППИРОВКИ

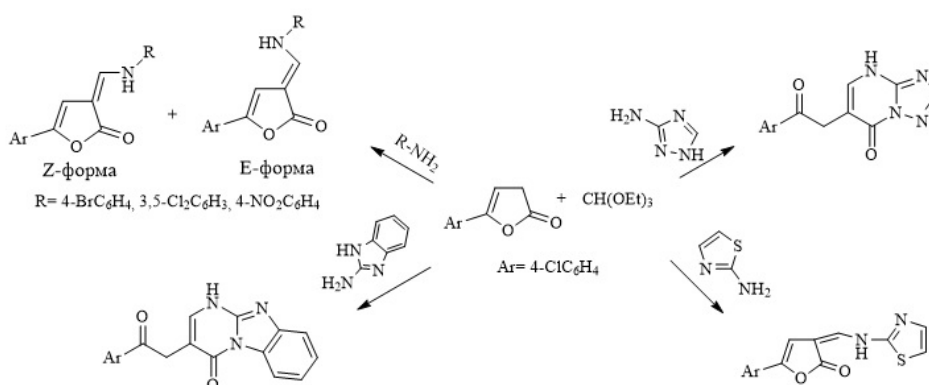
Тихомолова А.С.,<sup>а</sup> Майорова О.А.,<sup>б</sup> Егорова А.Ю.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет  
им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Астраханская, 83,  
e-mail: bondartsova.alexandra@yandex.ru

<sup>б</sup>Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов  
Российской академии наук, Саратов, проспект Энтузиастов, 13

Соединения, имеющие в своем составе 3H-фуран-2-оновый фрагмент, привлекают внимание химиков-синтетиков в качестве высокоактивных синтонов в построении практически важных молекул<sup>1</sup>.

Разработаны оптимальные условия синтеза 5-арил-3-арил(гетарил)аминометилиден-3H-фуран-2-онов на основе оп-rot конденсации фуранонов, ортоэфира и аминов ароматического и гетароматических рядов. Определены особенности реакционной способности изучаемых соединений и установлено, что введение (гет)ариламинометилиденового фрагмента расширяет синтетические возможности этих веществ.



Впервые показано, что синтезированные соединения существуют в виде смеси (Z)- и (E)-изомеров<sup>2</sup>. Установлено, что некоторые гетарилами-нометилиден замещенные 3H-фуран-2-оны применяются в синтезе новых производных (бензо)имидазоло(триазоло)пиримидиновых систем.

Выявлены факторы, определяющие направление реакции и структуры образующихся продуктов. Исследованы структура и свойства синтезированных соединений, определена их стабильность.

### Литература

1. Mayorova O.A., Grinev V.S., Yegorova A. Yu. *Arabian Journal of Chemistry*, 2021, **14**(2), 1–9.
2. Osipov A.K., Anis'kov A.A., Grinev V.S., Yegorova A.Y. *Magnetic Resonance in Chemistry*, 2017, **55**(8), 730–737.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №19-33-60038

# РЕАКЦИЯ 2-ЭТОКСИПИРРОЛИДИНОВ С КАРБОНИЛЬНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ – ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ НОРГИГРИНА

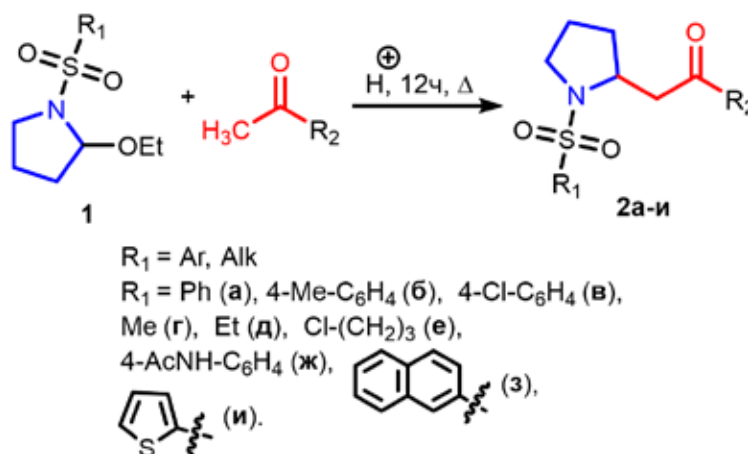
**Турманов Р.**<sup>а,б</sup>, Смолобочкин А.<sup>а</sup>, А. Газизова, Бурилов А.<sup>а</sup>, Пудовик М.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ  
Казанский научный центр РАН,  
420088, Россия, г. Казань, ул. А. Арбузова, д.8.*

<sup>б</sup> *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»,  
420015, Россия, г. Казань, ул. К. Маркса, д.68.  
e-mail: t.rahimjan.91@mail.ru*

Пирролидины являются одним из наиболее важных и широко распространенных классов гетероциклических соединений. Особый интерес вызывают норгигрин и его производные, поскольку обладают различной физиологической активностью. Среди них можно отметить алкалоиды гигрин, кускоигрин, русполинон, норрусполинон и др. Поэтому разработка новых методов синтеза соединений этого класса является актуальной задачей.

Нами разработан метод синтеза пирролидинов, содержащих терминальную карбонильную группу, на основе реакции 2-этоксипирролидинов с карбонильными соединениями. Предложенный метод отличается простотой исполнения, доступностью реагентов и катализаторов.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-13-00022, <https://rscf.ru/project/21-13-00022/>

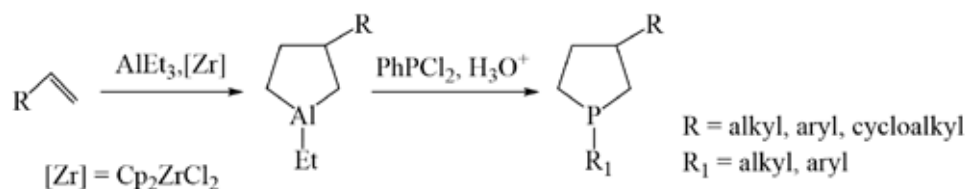


# ДИЗАЙН ПЯТИЧЛЕННЫХ ЦИКЛИЧЕСКИХ ФОСФОРОРГАНИЧЕСКИХ ЛИГАНДОВ: МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ 3-ЗАМЕЩЕННЫХ ФОСФОЛАНОВ В РЕАКЦИИ АЛЮМОЛАНОВ С ГАЛОГЕНИДАМИ ФОСФОРА

**Тюмкина Т.В.,** Нурисламова Р.Р., Махаматханова А.Л., Халилов Л.М.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,  
450075, Уфа, проспект Октября 141,  
e-mail: ttvnmr@gmail.com*

Недавно нами разработан перспективный для практического применения метод синтеза 3R-замещенных 1-фенил(алкил)фосфоланов (R=Alk, Ph), основанный на реакции PhPCl<sub>2</sub> с соответствующим 1-этил-3R-замещенным алюмоланом<sup>1,2</sup>, который синтезируется в одну препаративную стадию в результате каталитического циклоалюминирования непредельных соединений (алкенов, алкинов и т.д.)<sup>3</sup>.



Подобный синтетический подход для получения новых P-Hal либо P-NHAlk производных фосфоланов оказались не столь успешными, хотя данный класс соединений является востребованным не только в качестве лигандов в составе каталитических систем, но также в качестве антисептиков, инсектицидов, потенциальных пролонгаторов лекарственных средств итд. С целью разработки стратегии синтеза труднодоступных фосфоланов (фосфоленов) было проведено теоретическое и экспериментальное исследование механизма реакций замены атома алюминия на атом фосфора в предельных и непредельных пятичленных циклах. В результате DFT моделирования (метод PBE/3ζ<sup>4</sup> Priroda 6) возможных маршрутов взаимодействия алюмоланов (3,4-дигидроалюмолов) с PCl<sub>3</sub> (PBr<sub>3</sub>) и PPhCl<sub>2</sub>, а также мониторинга данных реакций с помощью мультядерной ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>31</sup>P, <sup>27</sup>Al спектроскопии, предложены модели механизмов, описывающих элементарные стадии и стабильные интермедиаты. С учетом полученных данных оптимизированы условия синтеза целевых 1-хлор(амино, гидро)-3R-фосфолан(ен)ов.

## Литература

1. D'yakonov V.A., Makhamatkhanova A.L., Agliullina R.A., Dilmukhametova L.K., Tyumkina T.V., Dzhemilev U.M., *Beilstein J. Org. Chem.*, 2016, **12**, 406.
2. V. A. D'yakonov, A. L. Makhamatkhanova, L. K. Dilmukhametova, R. A. Agliullina, T. V. Tyumkina and U.M. Dzhemilev, *Organometallics*, 2015, **34**, 228.
3. Dzhemilev, U.M.; D'yakonov, V.A. Hydro-, Carbo- and Cycloaluminum of Unsaturated Compounds. In *Modern Organometallics: Preparation, Structure, Reactivity and Use*; Woodward, S., Dagorne, S. Ed.; Springer: Berlin Heidelberg, 2013; Vol. 41, pp 312
4. Laikov D.N. *Chemical Physics Letters*, 1997, 281. 151.

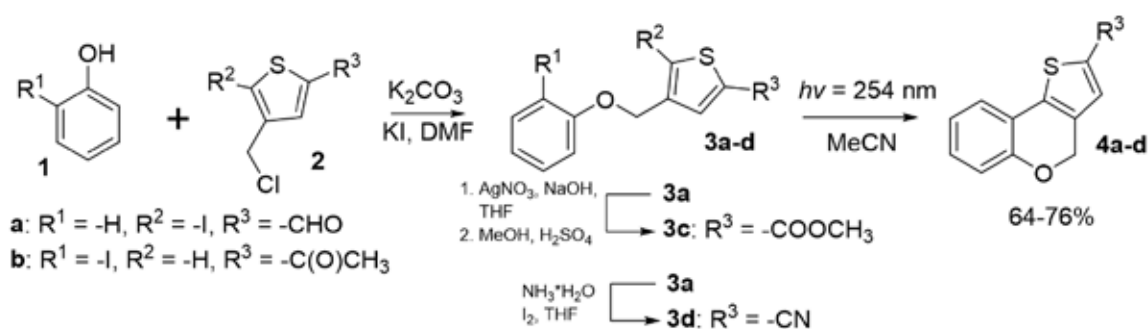
# ФОТОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ 2-ФУНКЦИОНАЛЬНОЗАМЕЩЕННЫХ 4H-ТИЕНО[3,2-С] ХРОМЕНОВ

Ульянкин Е.Б.,<sup>а,б</sup> Костюченко А.С.,<sup>а,б</sup> Фисюк А.С.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>ФГБОУ ВО «Омский государственный технический университет»,  
644050, Омск, пр. Мира, 11  
e-mail: e.b.ulyankin@gmail.com

<sup>б</sup>ФГБОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М.Достоевского»,  
644077, Омск, пр. Мира, 55а

Производные 4H-тиено[3,2-с]хроменов находят применение как биологически активные вещества. Они проявляют противовоспалительную, обезболивающую, антиаллергическую и другие виды активности<sup>1,2</sup> Разработан способ получения 2-функциональнозамещенных тиенохроменов **4** основанный на фотохимической циклизации феноксиметилтиофенов **3**, полученных из доступных фенолов **1** и 3-хлорметилтиофенов **2**.<sup>3</sup>



Получена серия 4H-тиено[3,2-с]хроменов **4 a-d**. Изучено влияние заместителей в тиофеновом цикле **3** на кинетику и выход продуктов фотоциклизации.

## Литература

1. Bogza Yu.P., Katsiel' A.L., Sharypova A.N., Tolstikova T.G., Fisyuk A.S. *Chem. Heterocycl. Compd.*, 2015, **50**, 1712.
2. Hegab M.I., Abdulla M.M. *Arch. Pharm. Chem. Life Sci.*, 2006, **41**, 339.
3. Ulyankin E.B., Bogza Yu.P., Kostyuchenko A.S., Chernenko S.A., Samsonenko A.L., Shatsauskas A.L., Yurpalov V.L., Fisyuk A.S. *Synlett*, 2021, **32**, 790.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 20-73-10043.

# ПРИМЕНЕНИЕ СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ НЕКОВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КРИСТАЛЛАХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

[Файзуллин Р.Р.](#),<sup>a</sup> Штейнгольц С.А.,<sup>a</sup> Сташ А.И.,<sup>b</sup> Цирельсон В.Г.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Институт органической и физической химии  
им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,  
e-mail: robert.fayzullin@gmail.com*

<sup>b</sup> *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН*

<sup>c</sup> *Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева*

Выполнен детальный анализ полного набора локальных потенциалов, входящих в уравнении Эйлера для электронной плотности, на примере ковалентных и нековалентных взаимодействий в кристаллах производных урацила и изоциануровой кислоты. Функция электронной плотности была получена в рамках мультипольной модели по данным прецизионного рентгенодифракционного эксперимента или из теоретических структурных факторов. Описаны внутри- и межмолекулярные неклассические водородные связи,  $S=O \cdots O=S$ ,  $\pi \cdots \pi$  и  $C=O \cdots \pi$  взаимодействия, определяющие структуру исследованных кристаллов. Донорно-акцепторный характер этих взаимодействий описан путем анализа потенциалов Паули и фон Вайцзеккера, а также функции локализации электронов и плотности информации Фишера. Суперпозиция атомных бассейнов (см. рисунок) с атомоподобными бассейнами электростатического и кинетического потенциалов позволила нам описать перенос заряда и природу межатомных взаимодействий.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 17-13-01209.*

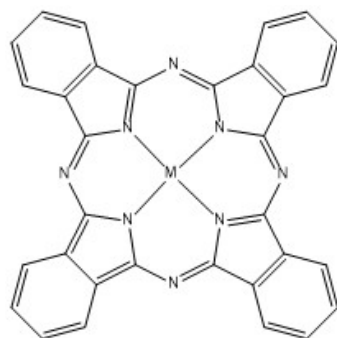
# СОЕДИНЕНИЯ ВОССТАНОВЛЕННЫХ ЗАМЕЩЕННЫХ ПОРФИРАЗИНОВ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, СВОЙСТВА

**Фараонов М.А.,<sup>а</sup> Кузьмин А.В.,<sup>б</sup> Конарев Д.В.<sup>а</sup>**

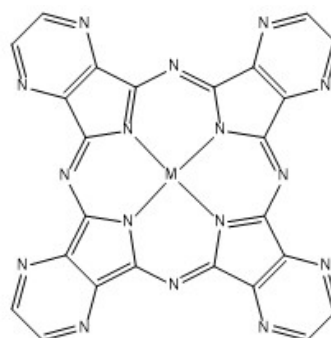
*<sup>а</sup>Институт проблем химической физики Российской Академии Наук,  
142432, Московская область, Черноголовка, проспект Академика Семенова 1,  
e-mail: maksimfaronov@yandex.ru*

*<sup>б</sup>Институт физики твердого тела Российской Академии Наук,  
142432, Московская область, Черноголовка, улица Академика Осипьяна 2*

Порфирины и их аналоги представляют собой обширный класс макрогетероциклических соединений, которые находят широкое применение в ряде наукоемких областей – при изготовлении светоизлучающих диодов, солнечных ячеек, транзисторов, устройств записи и хранения информации и др. Фталоцианины давно используются как красители и пигменты и производятся в промышленности в больших масштабах.



**Фталоцианин**



**Тетрапиразинопорфирин**

Восстановление или окисление макроциклов приводит к появлению делокализованного на макроцикле неспаренного электрона. Такие соединения могут обладать рядом интересных свойств (например, металлической проводимостью, гигантским магнетосопротивлением, ферромагнитными взаимодействиями и ферромагнитным упорядочением спинов)<sup>1,2</sup>.

Процессы окисления макрогетероциклов (в частности фталоцианинового цикла) хорошо изучены. Исследования последних лет показывают, что соединения с восстановленными макрогетероциклами, как и окисленные макроциклы, так же могут обладать разнообразными физико-химическими свойствами.

В этой работе нами получена серия кристаллических солей на основе восстановленных замещенных порфиразинов. Установлена кристаллическая структура исследуемых соединений, их оптические и магнитные свойства.

## Литература

1. Inabe T., Tajima H., *Chemical Reviews*, 2004, **104**, 5503.
2. Inabe T., Hanasaki N., *Magnetochemistry*, 2017, **3**, 18.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 21-73-10207.*

# СИНТЕЗ, СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ФОТОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НОВЫХ *орто*-СТИРИЛЗАМЕЩЕННЫХ N-ГЕТЕРОЦИКЛОВ

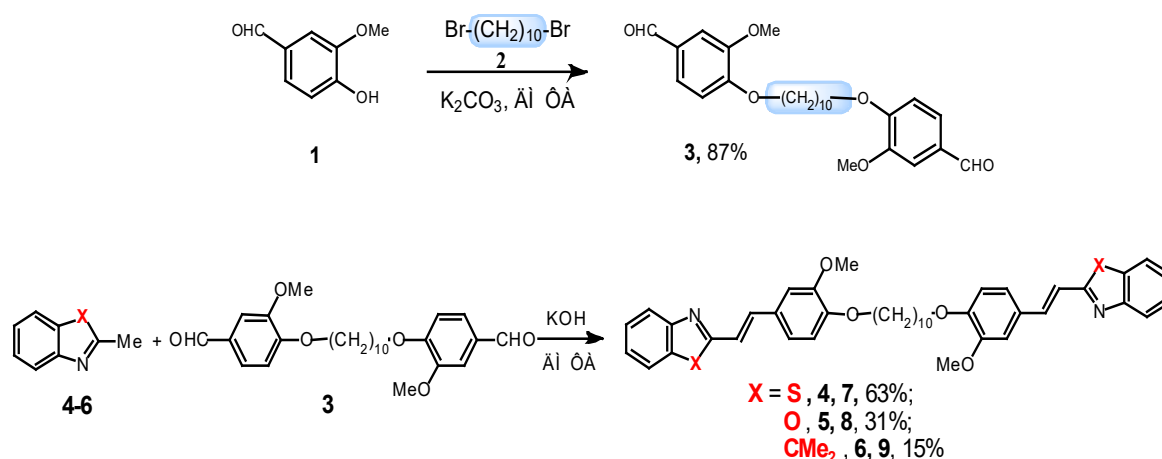
[Федоров Ю.В.](#), Сайфутярова А.Э., Гулакова Е.Н., Федорова О.А., Черникова Е.Ю.

ФГБУН Институт элементоорганических соединений  
 им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук,  
 119991, Россия, г. Москва, ул. Вавилова 28

Интерес к стироловым производным азагетероциклов во многом обусловлен их биологической активностью и применением в медицине в качестве противовирусных, антибактериальных и антибластомных средств. Благодаря способности связываться с ДНК, эти соединения могут ингибировать различные процессы, происходящие в живых клетках, а их спектральные характеристики позволяют применять данные соединения, например, в качестве флуоресцентных меток в биологических объектах.

В настоящей работе предложен дизайн и впервые синтезированы неизвестные ранее бис(стирилзамещенные) производные бензотиазола, бензоксазола и диметилиндола. Спектральные и фотохимические исследования подтвердили высокую фотоактивность полученных соединений.

Схема 1



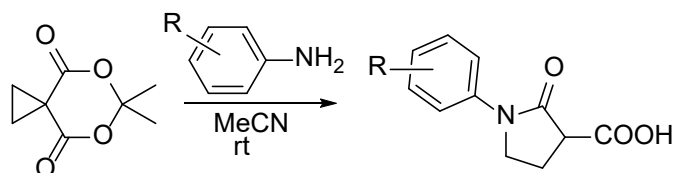
Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №19-43-04127). Регистрация спектров ЯМР, элементный анализ проведены при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации с использованием научного оборудования Центра исследования строения молекул ИНЭОС РАН.

# ЭФФЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ 2-ОКСОПИРРОЛИДИН-3-КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В СИНТЕЗЕ СПИРО-β-ЛАКТАМОВ ПО ШТАУДИНГЕРУ

[Филатов В.Е.](#), Белоглазкина Е.К.

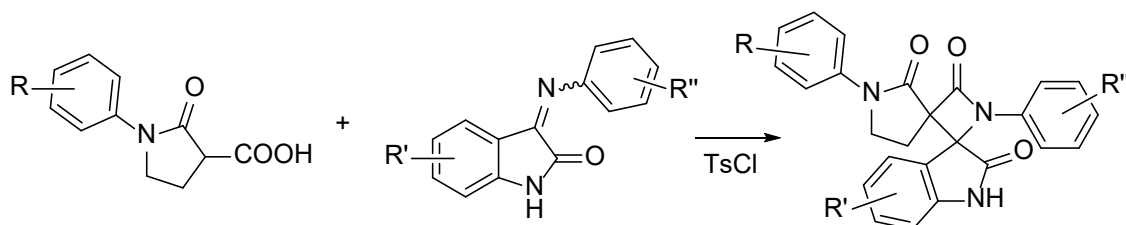
МГУ имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, Кафедра органической химии, НИЛ БАОС,  
119991, Москва, Ленинские горы, 1-3,  
e-mail: NanoVF@mail.ru

Благодаря наличию фармакофорных и легко модифицируемых амидной и карбоксильной функциональных групп, 2-оксопирролидин-3-карбоновые кислоты являются перспективными молекулами для использования в органическом синтезе и биомедицинского применения. В частности, структурный фрагмент производных 2-оксопирролидин-3-карбоновых кислот входит в состав потенциальных агентов противоопухолевой таргетной терапии - ингибиторов белкового рецептора c-Met1.



На основе модификации предложенной в работе <sup>2</sup> синтетической стратегии, нами была разработана оптимизированная методика синтеза N-арил-2-оксопирролидин-3-карбоновых кислот, позволяющая получать продукты с широким спектром заместителей в N-арильном фрагменте.

Помимо этого, было показано, что синтезируемые N-арил-2-оксопирролидин-3-карбоновые кислоты могут быть использованы для получения спиро-β-лактамов по реакции Штаудингера с препаративными выходами.



## Литература

1. S. Raepfel et al. N-(3-fluoro-4-(2-arylthieno[3,2-b]pyridin-7-yloxy)phenyl)-2-oxo-3-phenylimidazolidine-1-carboxamides: a novel series of dual c-met/vegfr2 receptor tyrosine kinase inhibitors. *Bioorganic Med. Chem. Lett.* **2009**, *19* (5), 1323–1328.
2. K. Singh and S. Danishefsky. Homoconjugate addition of nucleophiles to cyclopropane-1,1-dicarboxylate derivatives: 2-oxo-1-phenyl-3-pyrrolidincarboxylic acid. *Org. Synth.* **1981**, *60* (September), 66.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-33-90282, проект 19-03-00201.

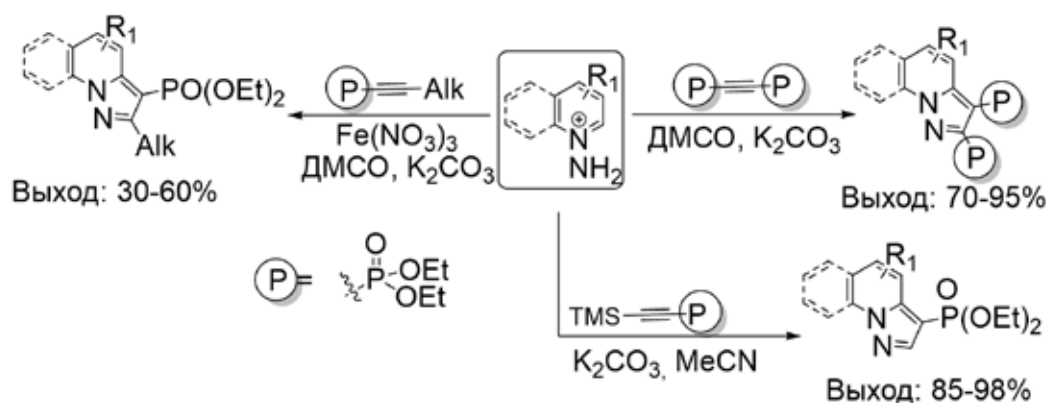
# СИНТЕЗ ФОСФОНАТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛО[1,5-А]ПИРИДИНОВ ИЗ АЛКИНИЛФОСФОНАТОВ

[Филиппов И.Р.](#)<sup>1</sup>, [Воробьев А.Ю.](#)<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН, просп. Академика Лаврентьева, д.9, Новосибирск, 630090, Россия, e-mail: [iphilipp@nioch.nsc.ru](mailto:iphilipp@nioch.nsc.ru)

Остов пиразоло[1,5-а]пиридинов широко используется в качестве строительного блока в дизайне лекарственных препаратов. Противовоспалительный препарат на основе пиразолопиридина – ибупрофен – применяется в странах юго-восточной Азии уже более 30 лет. Последние исследования показали, что ибупрофен может быть использован для лечения респираторных симптомов после COVID-19.

Таким образом, синтез новых соединений на основе остова пиразоло[1,5-а]пиридина является актуальной задачей. В данной работе представлены подходы к синтезу моно- и бифосфонатных производных пиразоло[1,5-а]пиридинов и их аннелированных аналогов по реакции [3+2]-циклоприсоединения солей N-азиния к фосфонатным производным ацетилена. Этинилбифосфонаты проявляют наибольшую реакционную способность в реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения и были получены с высокими выходами. Алкил- и фенилэтинилфосфонаты значительно менее активны – добавка катализатора  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$  позволила получить целевые соединения с умеренным выходом. ТМС-этинилфосфонаты реагируют с элиминированием ТМС-группы, а монофосфонатные производные пиразоло[1,5-а]пиридинов образуются с отличным выходом.



Работа выполнена при поддержке Министерства науки и образования РФ, проект № 0238-2019-0005.

# СИНТЕЗ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПО КОЛЬЦУ А ПРОИЗВОДНЫХ АЛКАЛОИДОВ СИНОМЕНИНА И ТЕТРАГИДРОТЕБАИНА ПО РЕАКЦИИ 1,3 – ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

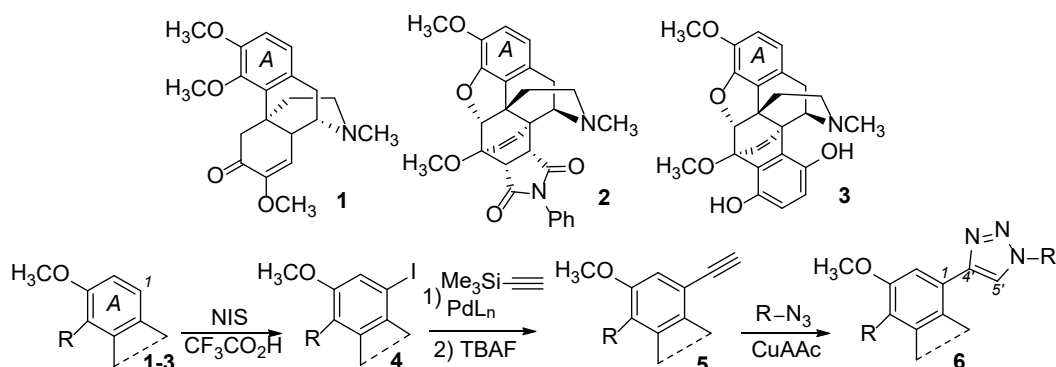
**Финк А.О., Морозова Е.А., Толстикова Т.Г., Шульц Э.Э.**

*Новосибирский институт органической химии*

*им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН),  
630090, Российская федерация, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д.9  
e-mail: nfinke@nioch.nsc.ru*

Структурные модификации растительных алкалоидов с введением гетероциклических заместителей или создание гибридных структур на основе доступных алкалоидов расширяют их структурные вариации и представляют новые возможности для получения соединений с селективностью фармакологического действия и меньшими побочными эффектами.

Нами разработан подход к синтезу 1,2,3-триазолилзамещенных производных синоменина **1** и С-аннелированных тетрагидртебаинов **2, 3**. Реакцией Соногаширы 1-иодзамещенных производных алкалоидов **4** (выход 66-92%) с триметилсилилацетиленом и последующей реакцией десилилирования продукта кросс-сочетания синтезировали терминальные ацетилены **5** (выход 73-85%). Реакцией 1,3-диполярного циклоприсоединения с различными азидами в присутствии соединений меди (I), селективно получили соответствующие 1,4-дизамещенные 1,2,3-триазолы **7** (выход 40-80%).



Обсуждаются результаты исследования анальгетической активности и цитотоксичности синтезированных соединений.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ (проект № 18-13-00361).*



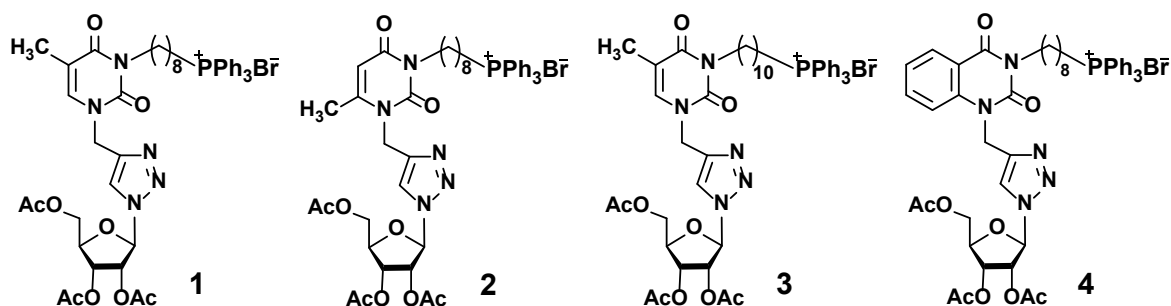
# СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ 1,2,3,-ТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩИХ АНАЛОГОВ ПИРИМИДИНОВЫХ НУКЛЕОЗИДОВ С ТРИФЕНИЛФОСФОНИЕВЫМ ФРАГМЕНТОМ

**Хабибулина Л.Р.,** Стробыкина И.Ю., Волошина А.Д., Андреева О.В., Сапунова А.С.,  
Любина А.П., Гумерова С.К., Беленок М.Г., Сайфина Л.Ф., Семенов В.Э., Катаев В.Е.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,  
420088, г. Казань, ул. Академика Арбузова, 8.  
e-mail: leysanchick@gmail.com*

Известно, что мембраны митохондрий раковых клеток обладают более высоким отрицательным потенциалом, чем у нормальных клеток [1]. Положительный заряд трифенилфосфониевых (ТФФ) солей используется для адресной доставки конъюгированных с ними цитостатиков различной природы в митохондрии раковых клеток [1,2]. Нами впервые синтезированы ТФФ-конъюгаты 1,2,3-триазоловых аналогов нуклеозидов **1-4**, проявивших как высокую и селективную цитотоксичность в отношении аденокарциномы двенадцатиперстной кишки (HuTu-80), так и высокую антибактериальную активность в отношении мультирезистентного штамма *S. aureus* (MRSA), выделенного от больных.

Таблица 1 – Цитотоксичность и антибактериальная активность соединений.



Соединение	<b>1</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
IC <sub>50</sub> (HuTu-80), μM	8.3	6.4	10.2
MIC (MRSA), μM	4.3	1.0	1.0

## Литература

- Ross MF, Kelso GF, Blaikie FH, et al. *Biochemistry (Moscow)*, 2005, **70**, 222-230.
- Kalyanaramana B, Cheng G, Hardy M, et al. *Redox Biology*. 2018, **14**, 319-327.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-13-00003)*

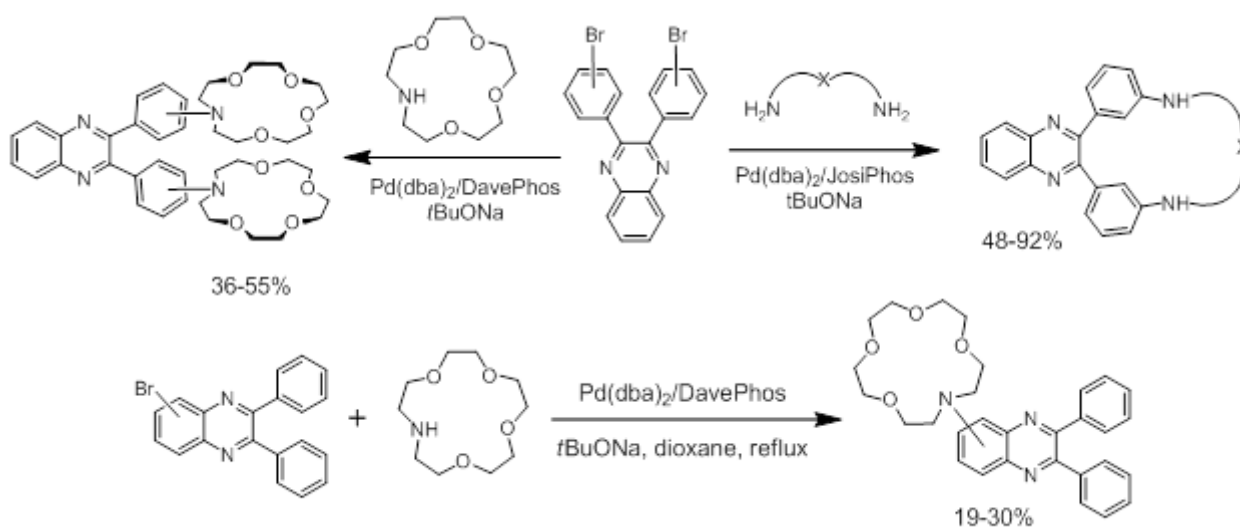
# МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ 2,3-ДИФЕНИЛХИНОКСАЛИНА: СИНТЕЗ И КООРДИНАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА

[Харламова А.Д.](#),<sup>a</sup> [Абель А.С.](#),<sup>a</sup> [Аверин А.Д.](#),<sup>a</sup>  
[Bessmertnykh-Lemeune A.G.](#),<sup>b</sup> [Белецкая И.П.](#)<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова,  
Химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы 1с3,  
<sup>b</sup>École normale supérieure de Lyon, Laboratoire de Chimie, UMR  
5182, Франция, Лион, 46 Allée d'Italie  
e-mail: [alisa-harlamova@mail.ru](mailto:alisa-harlamova@mail.ru)

Разработка новых флуоресцентных хемосенсоров, обеспечивающих селективный отклик на присутствие катионов металлов в различных средах, является актуальной задачей для современной синтетической органической химии. 2,3-дифенилхиноксалин и его производные обладают ярко выраженными флуоресцентными свойствами, однако малоизучены в качестве сигнальных групп.

В данной работе с использованием Pd-катализируемого аминирования синтезирована серия флуоресцентных лигандов, содержащих макроциклический ионофор в различных положениях 2,3-дифенилхиноксалина. Показана возможность введения азакраунэфирного фрагмента в качестве ионофора, а также создания макроциклических структур на основе 2,3-бис(3-бромфенил)хиноксалина с необычно высокими выходами (до 92 %).



Координационные свойства полученных лигандов были исследованы методами спектрофотометрии, флуориметрии и ЯМР.

Исследование выполнено в рамках русско-французской ассоциированной лаборатории LIA LAMREM при финансовой поддержке РФФИ (грант № 17-53-16012) и CNRS.

# СИНТЕЗ 2-АЛКИЛТИО-5-(1,2,4-ТРИАЗОЛ-1-ИЛМЕТИЛ)-1,3,4-ОКСАДИАЗОЛОВ С ФУНГИЦИДНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

**Цаплин Г.В.,<sup>а,б</sup> Попков С.В.,<sup>а</sup> Казаков С.А.<sup>а</sup>**

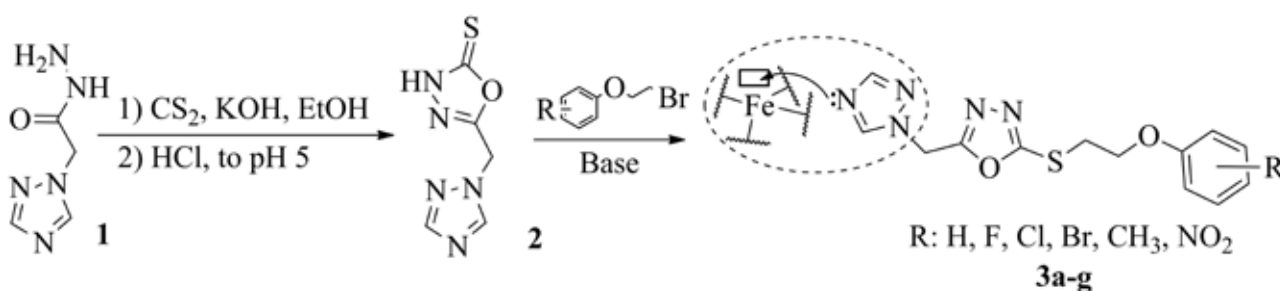
<sup>а</sup>Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева,  
125047, г. Москва, Миусская площадь, 9  
tsaplingv@muctr.ru,

<sup>б</sup>Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,  
119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47

На данный момент, грибковые заболевания широко распространены и поражают важные сельскохозяйственные культуры растений, животных, а также человека. Азолы это один из наиболее распространенных и эффективных классов фунгицидов использующихся, как в медицине, так и в сельском хозяйстве. Механизм их действия основан на ингибировании биосинтеза эргостерина, в частности ланостерин С14- $\alpha$ -деметилазы (CYP51).

На первом этапе нами была выбрана система из двух фармакофоров, таких как 1,2,4-триазол и 1,3,4-оксадиазол-2-тиол. Соединения с подобным строением, содержащие два гетероцикла, соединенных алкановым линкером, часто встречаются на современном рынке химических средств защиты растений и на рынке лекарственных препаратов, например *вориконазол*, *пропиконазол* и др. Предположительно введение липофильного S-заместителя в нашу систему, должно привести к улучшению пассивного транспорта и к более эффективному связыванию в активном сайте фермента.

Целевые 2-алкилтио-1,3,4-оксадиазолы были получены конденсацией гидразида 2-(1,2,4-триазол-1-ил)уксусной кислоты **1** с сероуглеродом в присутствии основания в этаноле при кипячении, с характерным выделением сероводорода и последующим алкилированием 1,3,4-оксадиазол-2-тиола **2** b-бромфенетами в присутствии основания с высокими выходами до 90%.



Соединения **3a-g** были исследованы на фунгицидную активность *in vitro*, по отношению к *Venturia inaequalis*, *Rhizoctonia solani*, *Fusarium oxysporum*, *Fusarium moniliforme*, *Bipolaris sorokiniana*, *Sclerotinia sclerotiorum* агар-диффузионным методом при концентрации 30 мг/мл [1] и показали высокую активность по отношению к фитопатогенам.

## Литература

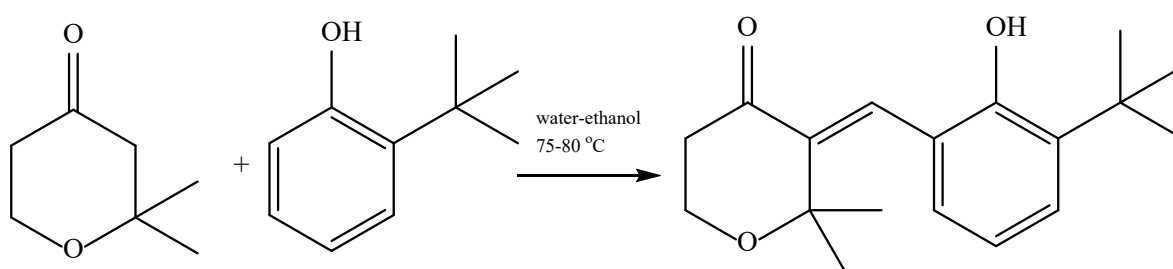
1. Gazieva, G. A. et al. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2017, **140**, 141.

# СИНТЕЗ 3-(3-ТРЕТБУТИЛ-2-ГИДРОКСИБЕНЗИЛИДЕН)-2,2-ДИМЕТИЛТЕТРАГИДРОПИРАН-4-ОНА

[Цукерман М.В.](#), Асылханов Ж.С., Кузьмина А.А., Калугин С.Н.

Казахский национальный университет им. аль-Фараби,  
г. Алматы, пр-т аль-Фараби 71, 050001  
mike-zv@yandex.ru

Производные тетрагидропирана проявляют широкий спектр биологической и поверхностной активности и находят широкое применение в медицине, а также в различных отраслях народного хозяйства<sup>1</sup>. В связи с этим получение новых производных тетрагидропиранонов и изучение их свойств представляет большой практический и теоретический интерес.



3-(3-третбутил-2-гидроксибензилиден)-2,2-диметилтетрагидропиран-4-он был получен взаимодействием 2,2-диметилтетрагидропиран-4-она с 3-третбутилсалициловым альдегидом в водно-этанольной среде при температуре 75-80 °С в течение 12 часов. В результате получен продукт с выходом 58 %.

Структура полученного соединения доказана с помощью ЯМР-спектроскопии. Спектры ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C снимали в хлороформе-D на спектрометре JNM-ECA 400 (Jeol) с рабочими частотами 400 (1H), 100 МГц (13C).

<sup>1</sup>H ЯМР δ 3.95 (td, *J* = 6.1, 1.8 Hz, 2H), 2.37 (td, *J* = 6.1, 3.2 Hz, 2H), 2.32 (d, *J* = 2.0 Hz, 2H), 1.34 (dd, *J* = 14.5, 1.9 Hz, 1H), 1.22 (d, *J* = 1.9 Hz, 6H).

<sup>13</sup>C ЯМР δ 207.79, 75.88, 61.01 (d, *J* = 16.2 Hz), 53.75, 41.72, 27.11 (d, *J* = 6.5 Hz).

## Литература

1. Калугин С.Н. Биологические поверхностно-активные соединения тетрагидропирана и пиперидина. Алматы: Казак университети, 2020. – 176 с.

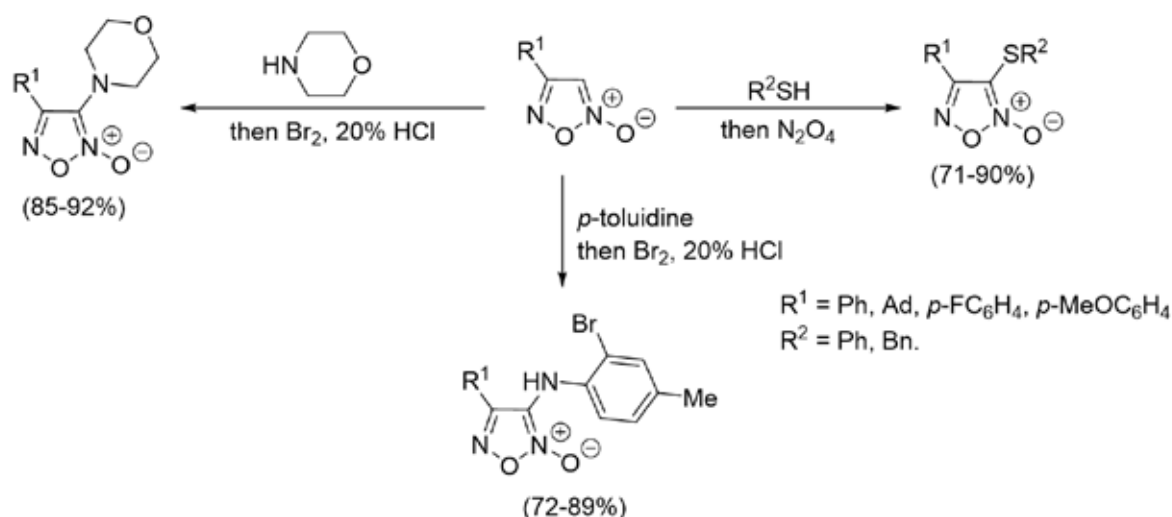
# НОВЫЙ ОДНОРЕАКТОРНЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА ДИЗАМЕЩЕННЫХ ФУРОКСАНОВ

Чаплыгин Д.А., Ферштат Л.Л.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: guguayo@gmail.com*

Оксид азота (II) обладает важной регуляторной функцией в организме человека. Фуроксаны, содержащие при C(3) атоме углерода цикла замещённую сульфидную или аминогруппу, представляют интерес в качестве потенциальных доноров оксида азота (II). Однако региоселективный синтез подобных соединений зачастую сопряжён с использованием труднодоступных исходных соединений, либо подразумевает множество стадий с низким суммарным выходом.<sup>1</sup>

В ранних исследованиях было установлено, что 4-арилфуроксаны могут легко раскрываться до  $\alpha$ -оксиминоацетонитрилоксидами, обладающих высокой реакционной способностью.<sup>2</sup> Данные интермедиаты легко вступают в реакции нуклеофильного присоединения с последующим образованием дизамещённых глиоксимов. В данной работе нами был разработан однореакторный региоселективный метод синтеза дизамещённых фуроксанов с высокими выходами. Поскольку монозамещённые фуроксаны являются относительно доступными соединениями, данная методика позволяет получать как ранее неизвестные, так и труднодоступные дизамещённые фуроксаны.



## Литература

1. K. Chegaev, B. Rolando, S. Guglielmo, R. Fruttero, A. Gasco. *J. Heterocycl. Chem.*, 2009 **46**, 866
2. D. A. Chaplygin; I. V. Ananyev; L. L. Fershtat; N. N. Makhova. *Synthesis* 2020, **52**, 2667.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-33-90205.*

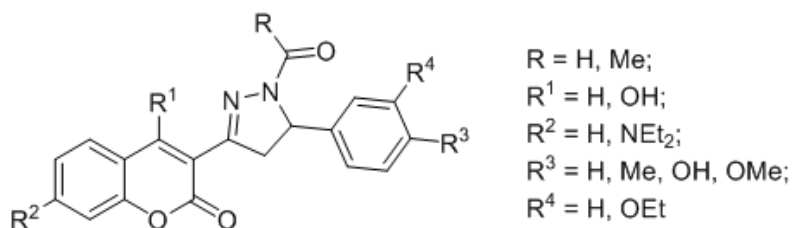
# ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЦИЛПИРАЗОЛИНОВ КУМАРИНОВОГО РЯДА

Чепцов Д.А., Светлова Ю.И., Володин Н.Ю.,  
Иванов И.В., Долотов С.М., Чибисова Т.А., Травень В.Ф.

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,  
125047, Москва, Миусская площадь 9,  
e-mail: dcheptsov@yandex.ru

Поиск новых соединений, обладающих флуоресценцией в твердой фазе и одновременно чувствительным к механическим и термическим воздействиям, является актуальным. Такие соединения перспективны для применения в оптической записи информации, сенсорах, в технологиях органических светодиодов (OLED).

В докладе сообщается о десяти ацилпиразолинах кумаринового ряда:



Было обнаружено, что данные соединения обладают высокоинтенсивной флуоресценцией как в растворе, так и в твердой фазе<sup>1,2</sup>. Методами квантовой химии установлено, что ключевую роль в фотофизических свойствах соединений играют межмолекулярные  $\pi\cdots\pi$ -взаимодействия.

Кроме того, показано, что соединения проявляют термо- и механохромные свойства, а межмолекулярные  $\pi\cdots\pi$ -взаимодействия обуславливают для них сольвато- и вапохромные свойства<sup>2</sup>. Полученные результаты свидетельствуют о возможности использования этих соединений для разработки сенсоров, а также в технологиях органических светодиодов (OLED).

## Литература

1. Traven V.F., Cheptsov D.A., Mamirgova Z.Z., Solovjova N.P., Martynenko V.M., Dolotov S.M., Krayushkin M.M., Ivanov I.V. *Photochemistry and Photobiology*, 2020, **96**, 798.
2. Traven V.F., Cheptsov D.A., Svetlova J.I., Ivanov I.V., Cuerva C., Lodeiro C., Duarte F., Dunaev S.F., Chernyshev V.V. *Dyes and Pigments*, 2021, **186**, 108942.

# НОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ Pd/NHC НА ОСНОВЕ АМИНО-1,2,4-ТРИАЗОЛОВ, СТАБИЛЬНЫЕ В ВЫСОКООСНОВНЫХ СРЕДАХ

Черненко А.Ю., Кутырев В.В., Астахов А.В., Чернышев В.М.

Южно-Российский Государственный политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова,  
 346428, Новочеркасск, ул. Просвещения 132  
 chernenko.andrew@mail.ru

В присутствии сильных кислородсодержащих оснований большинство комплексов палладия с N-гетероциклическими карбенами (Pd/NHC) разрушаются с разрывом связи Pd-NHC по пути O-NHC сочетания, что является важной проблемой для гомогенного катализа<sup>1</sup>.

Нами впервые показано, что ионизация NHC лиганда приводит к существенной стабилизации связи Pd-NHC и препятствует протеканию реакции O-NHC сочетания.<sup>2</sup> На основе 3-RNH-замещенных (R = ацил, арил, алкил) 1,2,4-триазол-5-илиденов, ионизирующихся в присутствии оснований, разработаны новые Pd/NHC комплексы, стабильные в высокоосновных средах. Полученные комплексы (например, **1a**, **1b**) в модельной реакции Сузуки-Мияуры в присутствии KOH и обеспечивают более высокие (более чем в 2 раза) значения TON, чем комплексы Pd/NHC без RNH группы или Pd(OAc)<sub>2</sub> (рис. 1).

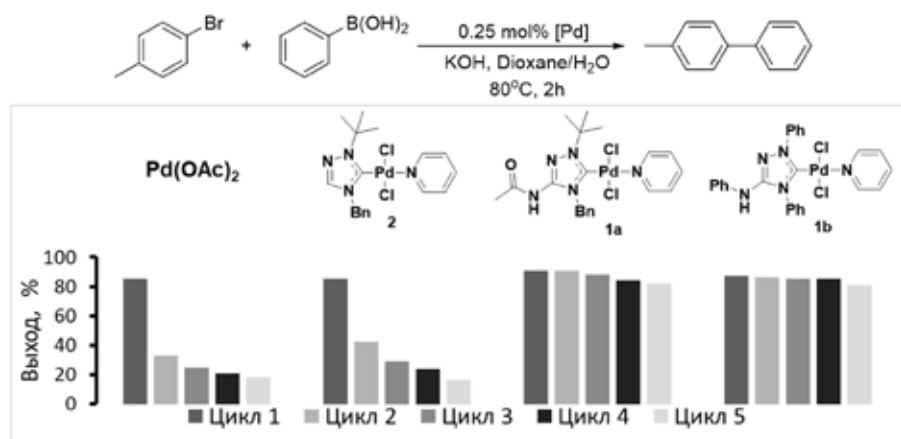


Рисунок 1. Сравнение каталитической активности соединений **1a** и **1b** с Pd(OAc)<sub>2</sub> и комплексом **2** в условиях рециклинга катализатора.

## Литература

- Chernyshev V. M., Khazipov O. V., Shevchenko M. A., Chernenko A. Yu., Astakhov A. V., Eremin D. B., Pasyukov D. V., Kashin A. S. and Ananikov V. P. *Chem. Sci.*, 2018, **9**, 5564.
- Chernenko A. Yu., Astakhov A. V., Kutuyev V. V., Gordeev E. G., Burykina J. V., Minyaev M. E., Khrustalev V. N., Chernyshev V. M., Ananikov V. P. *Inorg. Chem. Front.*, 2021, **8**, 3382.

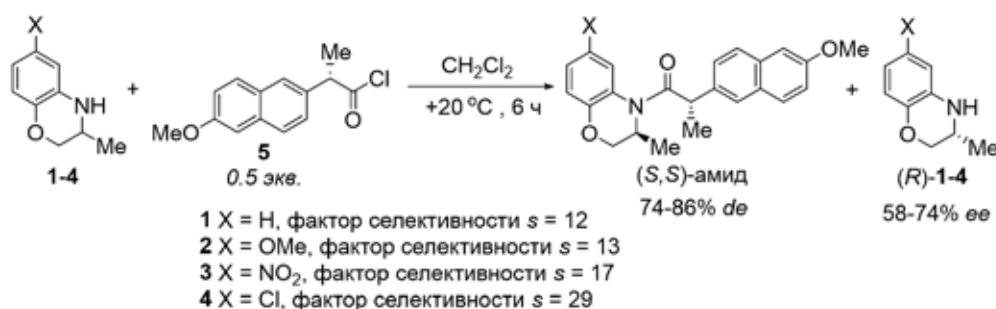
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-10100

# КИНЕТИЧЕСКОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ 6-ЗАМЕЩЁННЫХ 3,4-ДИГИДРО 3-МЕТИЛ-2*H*-[1,4]БЕНЗОКСАЗИНОВ В РЕЗУЛЬТАТЕ АЦИЛИРОВАНИЯ ХЛОРАНГИДРИДОМ (*S*)-НАПРОКСЕНА

**Чулаков Е.Н., Королева М.А., Садретдинова Л.Ш., Тумашов А.А., Левит Г.Л., Краснов В.П.**

Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,  
620108, Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской 22/20  
e-mail: chulakov@ios.uran.ru

Проведено изучение кинетического разделения рацемических 3-метил-бензоксазинов **1-4** хлорангидридом (*S*)-напроксена (**5**) в качестве хирального разделяющего агента в дихлорметане при +20 °С. Результаты диастереоселективного ацилирования (*de* образующихся (*S,S*)-амидов и *ee* непрореагировавшего (*R*)-амина) определены методом ВЭЖХ. Это позволило рассчитать фактор селективности *s*, представляющий собой отношение скоростей реакции быстро и медленно реагирующих энантио-меров субстрата,  $s = k_{\text{fast}}/k_{\text{slow}}$ . Установлено, что стереоселективность ацилирования хлорангидридом **5** зависит от природы заместителя в 6-м положении 3-метилбензоксазинов **1-4**.



Проведено квантово-химическое DFT-моделирование переходных состояний (ПС) в реакциях аминов **1-4** с хлорангидридом **5** на уровне теории CPSCM-CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>-B3LYP-D3-gCP/def2-TZVP//B3LYP-D3-gCP/def2-SVP. Показано, что в ПС преобладающих (*S,S*)-амидов реализуются ароматические взаимодействия реагентов по типу π-π-стекинга. Вычисленные значения фактора селективности хорошо согласуются с экспериментальными значениями.

Работа выполнена в рамках государственного задания АААА-А19-119011790134-1.



# ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ ФТОРИРОВАННЫХ ПИРРОЛОВ И ИХ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ

**Шамбалова В.Э., Ларкович Р.В., Алдошин А.С., Ненайденко В.Г.**

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
119991, Москва, Ленинские горы 1с3,  
e-mail: vshambalova00@gmail.com*

Одной из ключевых проблем в синтетической химии фторсодержащих соединений и медицинской химии является создание молекул, имеющих атом фтора в строго заданном положении молекулы. При этом наиболее удобным подходом является использование фторсодержащих строительных блоков для создания таких структур<sup>1</sup>. Пиррольное ядро является структурным фрагментом множества биологически активных соединений<sup>2</sup>. Кроме того, пирролы играют важную роль в синтетической химии как строительные блоки для построения ряда ценных структур, таких как дипиррометаны, BODIPYs, порфирины, и т. д.

Данная работа посвящена селективному синтезу монофторированных пирролов **2** на основе β-фтор-β-нитростирола на основе β-фтор-β-нитростирола по реакции Бартона-Зарда (Схема 1). Подобраны условия, обеспечивающие высокие выходы продукта **2** и высокую селективность реакции. Получена серия новых β-фторированных пирролов, которые представляют собой весьма привлекательные строительные блоки для синтеза фторированных порфиринов и BODIPY.

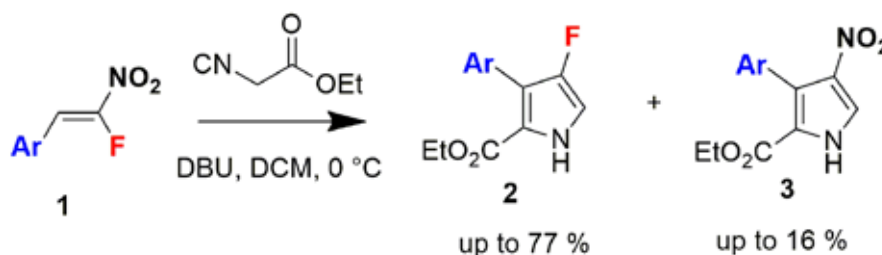


Схема 1. Реакция Бартона-Зарда между β-фтор-β-нитростиролами и этилизоцианоацетатом.

Показана возможность функционализации пирролов **2** (Схема 2).

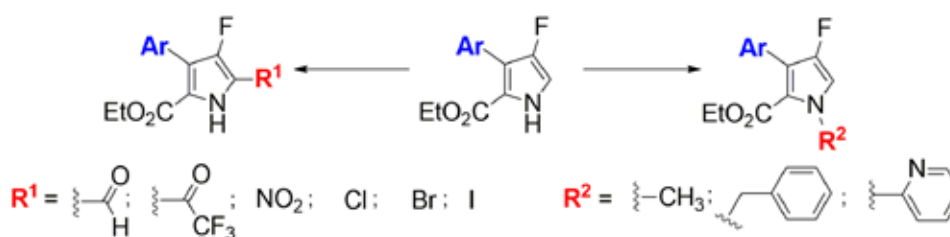


Схема 2. Функционализация пиррола **2**

## Литература

- Kondratov, I.S.; Tolmachova, N.A.; Haufe, G., *Eur. J. Org. Chem.*, 2018, 3618–3647
- Somnath S. Gholap., *Eur. J. Med. Chem.*, 2016, **110**, 13-31

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-33-70132.*

# ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЕНТАФЕНИЛФОСФОЛОКСИДОВ В КОНТЕКСТЕ АИЕ И АСQ ЭФФЕКТОВ: БАЛАНС МЕЖДУ ЖЕСТКОСТЬЮ И ГИБКОСТЬЮ ФОСФОЛОВОГО ЦИКЛА

Шайдудлин Р.Р.,<sup>а,б</sup> Галушко А.С.,<sup>а</sup> Пенцак Е.О.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: ruslan.shaidullin@chemistry.msu.ru*

<sup>б</sup>*Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова,  
117571, Москва, Ленинские горы д.1.*

При изучении 1,2,3,4,5-пентафенилфосфолоксида (PPPO) было показано, что ключевую роль в достижении повышенной эмиссии при агрегации (АИЕ эффект) имеет ограниченное движение периферических фенильных групп в кристалле<sup>1</sup>. Интересным вопросом является то, насколько выражен этот эффект в структурах, близких по строению, но уже имеющих другую конъюгацию электронов.

Среди различных производных фосфола мы сосредоточили наше внимание на 1,2,3,4,5-пентафенилфосфоле (PPP), и дигидропентафенил-фосфолоксиде (H2PPPO). Данное соединение имеет строение аналогичное PPPO: конъюгацию  $\pi$ -электронов, связанных с фосфором и наличие периферических фенильных групп за исключением того, что пятичленный гетероцикл уже не обладает ароматичностью.

В этой работе синтезированы и охарактеризованы три производных гетероциклических соединения PPP, PPPO и H2PPPO. PPP, PPPO и H2PPPO демонстрируют широкий диапазон варьирования спектра флуоресценции в видимой области, что достигается путем изменения конъюгации электронной плотности в гетероциклическом ядре при выборе синтеза материалов. H2PPPO дает флуоресценцию в синей области видимого спектра ( $\lambda_{\text{max}}=410$  нм), а PPPO ( $\lambda_{\text{max}}=510$  нм) PPP ( $\lambda_{\text{max}}=470$  нм) излучают в оранжевой и желтой областях соответственно.

PPPO и PPP проявляют слабую флуоресценцию в растворе, но могут сильно флуоресцировать в агрегированном состоянии при фотовозбуждении, демонстрируя очевидные характеристики АИЕ. Так ФФ(Квант. выход) в твердом состоянии составляет 0,42 и 0,33 для PPP и PPPO соответственно. При этом для H2PPPO состоящий из фосфолового цикла и пяти фенильных заместителей, как у PPP и PPPO не наблюдается ожидаемого эффекта АИЕ. Однако для H2PPPO не наблюдается и тушения флуоресценции при агрегировании (АСQ эффекта), хотя имеется значительный ФФ 0,17 в разбавленных растворах.

## Литература

1. Sanji T., Shiraishi K., Tanaka M., *Org. Lett.*, 2007, **9**, 3611.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-20124.*

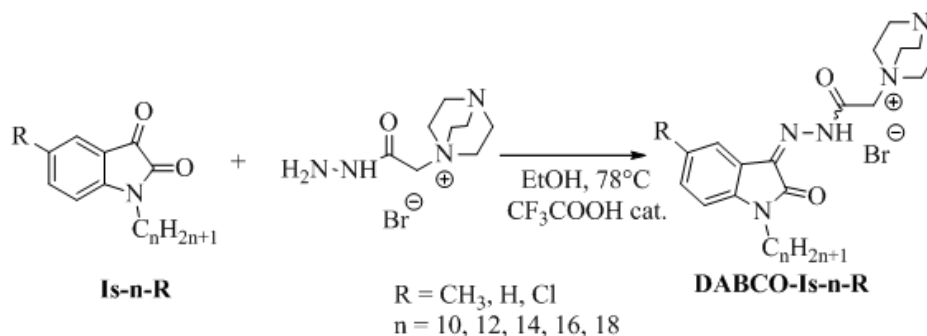
# СИНТЕЗ И САМООРГАНИЗАЦИЯ АНТИМИКРОБНЫХ АМФИФИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ИЗАТИНА НА ОСНОВЕ 1,4-ДИАЗАБИЦИКЛО[2.2.2]ОКТАНА

Шайхутдинова З.М., Паширова Т.Н., Богданов А.В., Миронов В.Ф.

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,  
 420088, Казань, Ак. Арбузова 8,  
 e-mail: shajhutdinova.z@mail.ru

Одной из стратегий улучшения антимикробной активности нетоксичных амфифильных соединений является создание супрамолекулярных ансамблей на их основе. Кватернизованные производные 1,4-дизабицикло[2.2.2]октана (DABCO) обладают отличительными особенностями в агрегационном поведении и низкой токсичностью. Изатин является удобной платформой для синтеза соединений, проявляющих биологическую активность, за счет наличия двух реакционных центров – карбонильной группы в положении 3 и эндоциклического атома азота.

В данной работе был осуществлен синтез производных изатина, содержащих катионизированный фрагмент DABCO и заместители различной длины в положении 1 и различной природы в положении 5 (DABCO-Is-n-R).



Процесс самоассоциации полученных соединений исследован методами тензиометрии, кондуктометрии, динамического рассеяния света и спектрофотометрии. Критическая концентрация ассоциации DABCO-Is-n-R на порядок ниже, чем для классических ПАВ. Солубилизационная емкость DABCO-Is-n-R в отношении Судана I возрастает с увеличением длины алкильной цепи от децильного производного к его октадецильному аналогу в 2.5 раза.

Наиболее эффективным антимикробным соединением в отношении *S. aureus* и *C. albicans* является DABCO-Is-12, значения МИК которого ниже, чем для препарата мирамистин и триметиламмониевых производных Is-12 и DABCO-12.

Авторы благодарят ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН за техническую поддержку проведенных исследований.

## 3-АМИНО-4-ФЕНИЛПИРИДИН-2(1H)-ОНЫ – НОВЫЕ ЛЮМИНИСЦЕНТНЫЕ КРАСИТЕЛИ ДЛЯ ИММУНОФЕРМЕНТНОГО АНАЛИЗА

[Шацаускас А.Л.](#),<sup>а</sup> Шаталин Ю.В.,<sup>б</sup> Шубина В. С.,<sup>б</sup> Заблоцкий Ю. А.,<sup>в</sup> Черненко С. А.,<sup>а</sup>  
Самсоненко А. Л.,<sup>а</sup> Костюченко А.С.,<sup>а,в</sup> Фисюк А. С.<sup>а,в</sup>

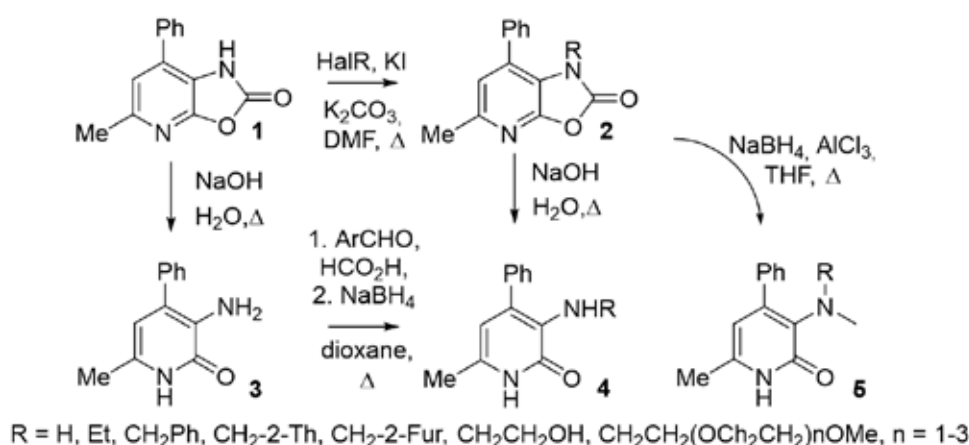
<sup>а</sup>ОмГТУ, 644050, Омск, пр. Мира, 11  
e-mail: a.l.shatsauskas@chemomsu.ru

<sup>б</sup>ИТЭБ РАН, 142290, Пущино, ул. Институтская 3

<sup>в</sup>ОмГУ им. Достоевского Ф.М., 644077, Омск. пр. Мира, 55а

Иммуноферментные методы анализа нашли широкое применение для диагностики патогенов, в том числе вирусов. Одним из наиболее часто используемых ферментов в ИФА является пероксидаза хрена (HRP).

Предложены три подхода к синтезу 3-алкиламино-4-фенилпиридин-2(1H)-онов **4,5**, основанные на щелочном гидролизе 1-алкилоксазолопиридинов **2**, восстановлении оксазолопиридинов **1,2** боргидридом натрия и восстановленном аминировании ароматических альдегидов боргидридом натрия в присутствии 3-аминопиридин-2(1H)-она **3**.



Для синтезированных соединений зарегистрированы электронные спектры. Максимумы поглощения соединений **3-5** лежат в области 320-339 нм, а испускания при 443-492 нм, квантовый выход люминесценции достигает 0.72. Исследовано поведение этих соединений в модельной системе зонд – H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> –HRP. При окислении красители теряют люминесцентные свойства. Содержание H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> и HRP в смеси были определены по затуханию люминесценции. Кинетические зависимости зонд-H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> и зонд-HRP носят линейный характер, а пределы обнаружения HRP и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> лежат в наномолярном диапазоне концентраций.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-13-00273.

## НОВЫЕ ДЕНДРИМЕРОПОДОБНЫЕ ТИАКАЛИКС[4] АРЕНЫ: СИНТЕЗ И АССОЦИАЦИЯ С ДНК

Шиабиев И.Э., Мостовая О.А., Падня П.Л., Стойков И.И.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,  
420111, Казань, ул. Кремлёвская 29/1,  
e-mail: shiabiev.ig@yandex.ru*

На сегодняшний день ДНК остаётся золотым стандартом для супрамолекулярной химии: высокое сродство комплементарных нуклеиновых оснований, хранение информации на структурном уровне, программируемые на уровне последовательности нуклеиновых оснований функции. ДНК находит применение в целом спектре направлений – в составе катализаторов, как строительные блоки в супрамолекулярной химии и материаловедении, как рецепторные фрагменты с уникальной чувствительностью, в генной инженерии и генной терапии, а также в качестве тестов на генетические отклонения и родство.

Комплексы между нуклеиновыми кислотами и макромолекулами играют важную роль во многих биохимических процессах, таких как молекулярное распознавание, биологический транспорт, регуляция транскрипции и доставка лекарств. В настоящее время наиболее широко исследуемыми являются комплексы нуклеиновых кислот с липосомами, различными катионными линейными полимерами и дендримерами. Дендримеры являются привлекательными макромолекулами для связывания ДНК из-за комбинации свойств, которые отличают их от других классов полимеров. Дендримеры монодисперсны, стабильны, обладают сравнительно низкой вязкостью при высоком молекулярном весе и множеством концевых групп, которые могут быть ионизированы, то есть могут эффективно связывать большое число генетического материала.

В данной работе были синтезированы дендримероподобные макроциклы первой генерации на платформе тиакаликс[4] арена, содержащие аминные терминальные группы, в трёх различных конфигурациях – конус, частичный конус и 1,3-альтернат. Была изучена ассоциация полученных макроциклов с ДНК из молок лосося методами УФ и флуоресцентной спектроскопии, спектроскопии кругового дихроизма, просвечивающей электронной микроскопии.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект 21-73-20067) и гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации (НШ-2499.2020.3).*

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ДВУХ СИММЕТРИЧЕСКИ НЕЗАВИСИМЫХ МОЛЕКУЛ В КРИСТАЛЛЕ МЕТИМАЗОЛА

Штейнгольц С.А., Файзуллин Р.Р.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,  
e-mail: sergey.shteingolts@yandex.ru*

В работе выполнено рентгенодифракционное исследование полиморфа метимазола с  $Z' = 2$ . Топологический анализ экспериментальной электронной плотности позволил выявить различия в распределении зарядовой плотности тиомочевинных фрагментов двух молекул, обусловленные, прежде всего, эффектами упаковки. Атом серы S(1a) демонстрирует две локализованные области положительной деформационной плотности, в то время как атом S(1b) является более диффузным с положительной деформационной плотностью, принимающей тороидальную форму. В отличие от S(1a), пара НЭП атома S(1b), найденная путем определения областей концентрации заряда валентной оболочки, значительно искажена и более повернута относительно молекулярной плоскости. DFT расчеты в кристалле и в газовой фазе для димера также подтверждают наличие искажений валентных оболочек атомов серы, однако менее выраженные. Были выявлены артефакты чрезмерного использования либо пренебрежения коэффициентами Грам-Шарлье, что отразилось в появлении «ложных» КТ (3, +3) лапласиана электронной плотности или расщеплении истинных. Поворот НЭП, анализ функции источника и заряды атомов указывают на уменьшение порядка связи C=S и увеличение вклада канонической структуры  $[\text{CH}_3-]\text{N}^{(+)}=\text{C}-\text{S}^{(-)}$  в  $\pi$ -сопряжение. Также в работе описаны межмолекулярные водородные связи N-H...S и взаимодействия C=S...S=C по типу «голова-к-голове».

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 17-13-01209.*

# СИНТЕЗ ДВОЙНЫХ NO-ДОНОРНЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ 1,2,5-ОКСАДИАЗОЛ-2-ОКСИДОВ И 5-ИМИНО-1,2,3-ОКСАДИАЗОЛОВ

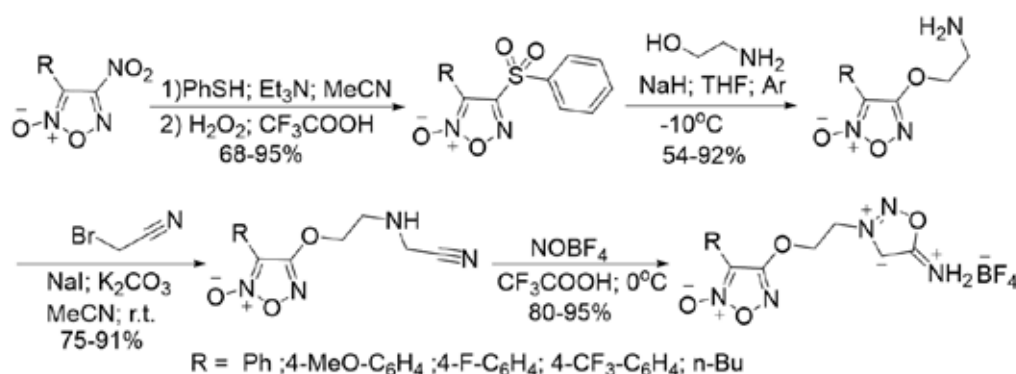
**Шуваев А.Д., Жилин Е.С., Ферштат Л.Л.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН  
119991, Москва, Ленинский проспект 47*

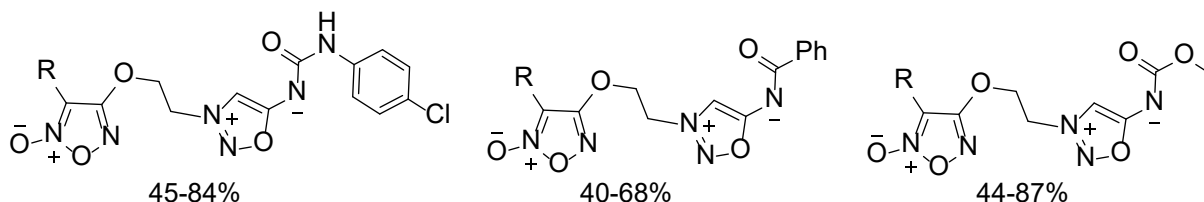
*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет,  
119991, Москва, Ленинские горы, 1 с.3  
e-mail: aleksandrbrauer17@gmail.com*

Экзогенные доноры оксида азота (II), среди которых известны нитроглицерин и алкилнитриты, как правило, склонны вызывать нитратную толерантность. Для получения NO-донорных структур, обладающих улучшенным фармакологическим профилем, все чаще используется метод молекулярной гибридизации различных соединений с известной фармакологической активностью. В настоящей работе в качестве известных фрагментов были выбраны 1,2,5-оксадиазол-2-оксид (фуроксан) и 1,2,3-оксадиазол-5-имин (сиднонимин).

В ходе исследований был разработан метод получения структур, объединяющих фуроксановый и сиднониминный фрагменты посредством оксиэтильного линкера.



Полученные сиднониминные соли вводились в реакции с различными ацилирующими агентами, в результате была получена серия структур, общие формулы которых представлены ниже.



# СИНТЕЗ 9,10-ДИГИДРО-5H-БЕНЗО[C]ИЗОХИНОЛИНО[1,2-G][1,7]НАФТИРИДИН-5,7(6H)-ДИОНОВ

Шувалов В.Ю.,<sup>a</sup> Черненко С.А.,<sup>a</sup> Фисюк А.С.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Омский государственный технический университет,  
пр. Мира, 11, Омск 644050, Россия,  
e-mail: fisyuk@chetomtsu.ru

<sup>b</sup>Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского,  
пр. Мира, 55а, Омск 644077, Россия

Пиридо[2,1-а]изохинолиновая система является важным гетероциклическим каркасом, который можно найти во многих биологически активных соединениях.1,2

В настоящей работе изучено взаимодействие азлактона **1** с легкодоступными 3,4-дигидроизохинолинами **2**,<sup>4,5</sup> которое приводит к производным 2H-пиридо[2,1-α]изохинолина **3**. 9,10-Дигидро-5H-бензо[с]изохинолино[1,2-g][1,7]нафтиридин-5,7(6H)-дионы **4** получены кипячением соответствующих соединений **3** в гидразингидрате с выходами 92-95% (Схема 1).

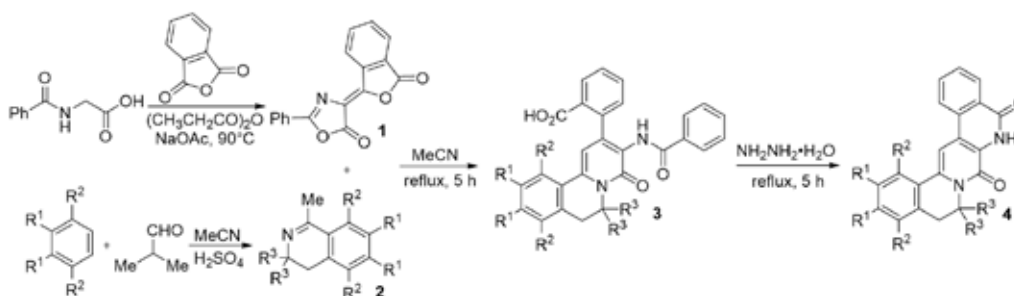


Схема 1. Синтез 5H-бензо[с]изохинолино[1,2-g][1,7]нафтиридин-5,7(6H)-дионов

## Литература

1. Kulkarni, S. K.; Dhir, A. *Phyther. Res.* 2010, **24** (3), 317–324.
2. Sharma, N.; Kumar, V.; Chopra, M. P.; Sourirajan, A.; Dev, K.; El-Shazly, M. *J. Ethnopharmacol.* 2020, **255**, 112736.
3. Puodzhyunas A. S., Kost A. N., Lubas A. A. *Pharm. Chem. J.* 1973, **7**, 9, 566–570.
4. Shklyayev Yu. V., Yeltsov M. A., Rozhkova Yu. S., Tolstikov A. G., Dembitsky V. M. // *Heteroat. Chem.* 2004, **15**, 486–493.
5. Moreno, L.; Cabedo, N.; Boulangé, A.; Párraga, J.; Galán, A.; Leleu, S.; Sanz, M.-J.; Cortes, D.; Franck, X. *Eur. J. Med. Chem.* 2013, **69**, 69–76.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект №19-13-00273.



# КОМПЛЕКСЫ РУТЕНИЯ С ЛИГАНДАМИ НА ОСНОВЕ МАЛЬТОЛА И ЕГО АНАЛОГОВ С ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТЬЮ

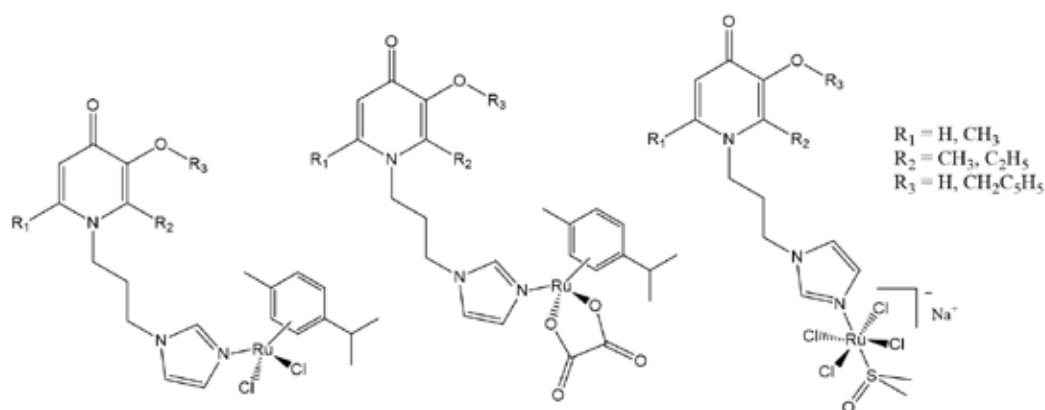
Шутков И.А., Кхан Н.А., Милаева Е.Р., Назаров А.А.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, кафедра медицинской химии и тонкого органического синтеза. 119991, Москва, Ленинские горы 1 стр. 3, e-mail: ia.shutkov@gmail.com

За последние годы большое внимание уделено противоопухолевым соединениям рутения, которые по сравнению с платиновыми обладают рядом преимуществ, например, меньшей общей токсичностью и не обладают кросс-резистентностью по отношению к платиновым препаратам.

Один из популярных подходов в современной литературе заключается во введении биологически активного биологического фрагмента, также модификация окружения рутения позволяет корректировать такие важные фармакокинетические параметры как стабильность, водорастворимость, липофильность и другие.

В данной работе будут представлены новые соединения с имидазол-модифицированными органическими лигандами, содержащими пиридиновый фрагмент (мальтол, аламальтол и этилмальтол). Комплексы исследованы на цитотоксичность *in vitro* на библиотеке клеточных линий рака человека, изучена стабильность соединений и проведен анализ структура-активность.



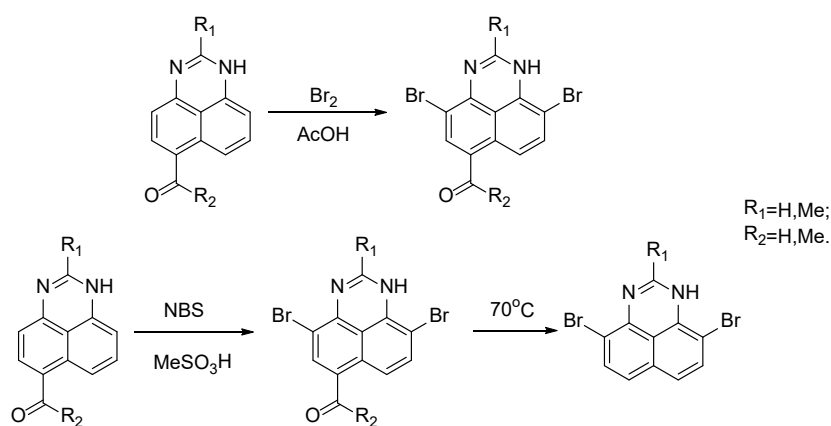
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-03-00394.

# ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ ГАЛОГЕНИРОВАНИЯ АЛЬДЕГИДОВ И КЕТОНОВ ПЕРИМИДИНОВОГО РЯДА

**Щербаков С.В., Вендин М.В., Щербакова В.Ю., Аксенов А.В.**

*Северо-Кавказский федеральный университет,  
355009, Ставрополь, ул. Пушкина. 1  
E-mail: sshcherbakov@ncfu.ru*

На протяжении последних двух лет нашей лабораторией активно изучаются методы синтеза и функционализации реакциями кросс-сочетания, катализируемые переходными металлами галогензамещенных 1,3-дизапиренов. Анализ литературных данных показал, что методы функционализации с помощью реакций кросс-сочетания галогенпроизводных 1*H*-перимидинов, которые являются предшественниками 1,3-дизапиренов, ранее не изучались. Синтез галогензамещенных 1*H*-перимидинов был описан в двух статьях. Ходжсон и Хафвэй синтезировали 2-метил-6(7)-бромперимидин замыканием пиридинового цикла в 4-бром-1,8-нафтилендиамине<sup>1</sup>. Кузьменко и Пожарский исследовали хлорирование перимидина и 2-метилперимидина сульфурилхлоридом<sup>2</sup>. Поэтому, первоочередной задачей мы выделили исследование возможности синтеза более широкого круга 2-замещенных 6(7)-бромперимидинов. Нами были изучены реакции галогенирования альдегидов и кетонов перимидинового ряда:



## Литература

- Hodgson H. N., Hathway D. E. 141. The preparation and chromoisomerism of 4: 5-dinitro-1-naphthylamine, and some perimidines and perinones from 4-chloro-and 4-bromo-1: 8-naphthylenediamine //Journal of the Chemical Society (Resumed). – 1945. – С. 543-545
- Kuz'menko V. V., Pozharskii A. F. Heterocyclic analogs of pleiadiene XXXV. Investigation of chlorination of perimidine and its 1-and 2-methyl derivatives //Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 1978. – Т. 14. – №. 7. – С. 788-794.

*Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № МК-2298.2021.1.3*

# НОВЫЕ РЕАКЦИИ N-ЦИАНОАЦЕТИЛИРОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ АМИНОВ

**Чигорина Е.А.,<sup>а,б</sup> Дидикина Т.С.,<sup>в</sup> Лукина Д.Ю.,<sup>в</sup> Глушко В.Н.,<sup>а</sup> Ретивов В.М.,<sup>а,б</sup> Доценко В.В.,<sup>в,г</sup> Аксенов Н.А.,<sup>г</sup> Аксенова И.В.<sup>г</sup>**

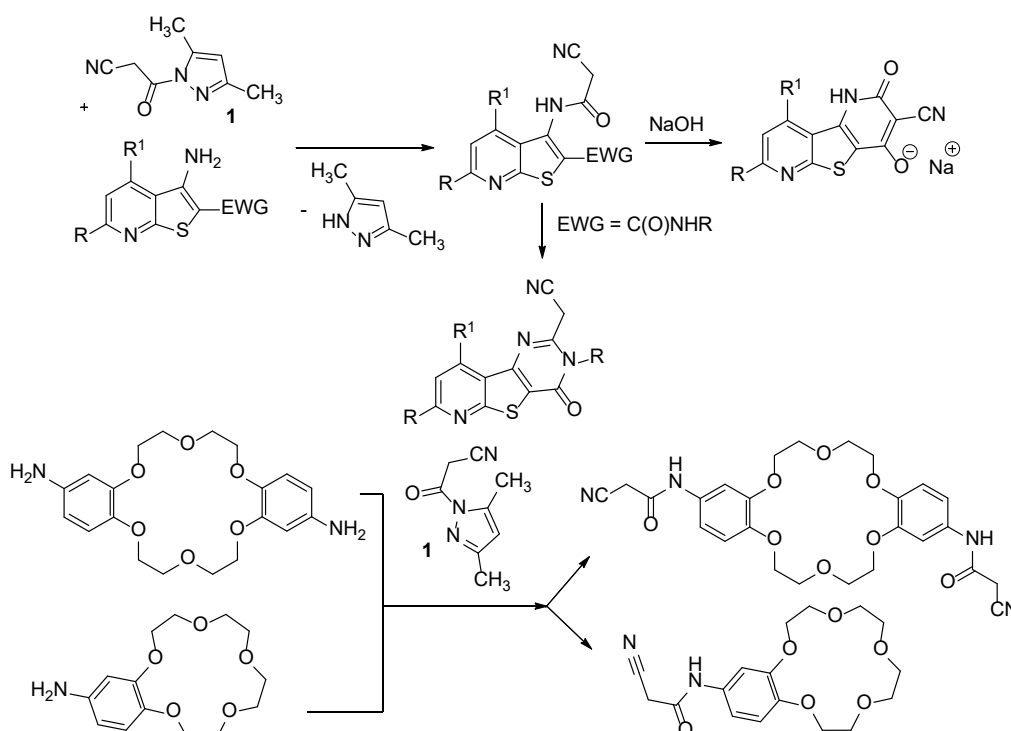
<sup>а</sup>НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, 107076, Москва, Богородский вал 3,  
e-mail: echigorina@mail.ru

<sup>б</sup>НИЦ «Курчатовский институт», 123182, Москва, пл. Академика Курчатова 1

<sup>в</sup>Кубанский государственный университет, 350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149

<sup>г</sup>Северо-Кавказский федеральный университет, 355017, Ставрополь, ул. Пушкина 1

Цианоацетамиды являются важными реагентами для конструирования различных гетероциклических систем и биологически активных соединений. Одним из наиболее удобных реагентов для проведения цианоацетилирования аминов является цианоацетилпиразол **1**. Исходя из ряда замещенных гетероциклических аминов, нами была получена библиотека ранее не описанных в литературе цианоацетамидов. Дальнейшая циклизация некоторых из полученных цианоацетамидов приводит к образованию полигетероциклов ряда тиено[2,3-*b*]пиридина.



Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Краснодарского края в рамках научного проекта № 19-43-230007.

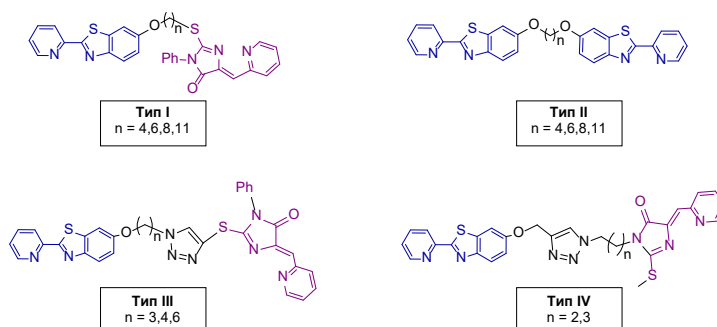
Работа выполнена с использованием научного оборудования ЦКП НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА.

# НОВЫЕ ДИТОПНЫЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ ЛИГАНДЫ С ПИРИДИЛМЕТИЛЕНИМИДАЗОЛОНОВЫМИ И ГЕТАРИЛАЗОЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ: СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ В РЕАКЦИЯХ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ

**Чорбу А.А.<sup>1</sup>, Барская Е.С.<sup>1</sup>, Ржеутский А.В.<sup>1</sup>, Полякова М.Н.<sup>1</sup>, Абрамович М.С.<sup>2</sup>,  
Моисеева А.А.<sup>1</sup>, Григорьев Г.П.<sup>1</sup>, Березина А.В.<sup>1</sup>, Зык Н.В.<sup>1</sup>, Белоглазкина Е.К.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова  
119991, Ленинские горы, дом 1, строение 3, Москва, Россия  
<sup>2</sup> Факультет наук о материалах МГУ им. М. В. Ломоносова  
119234, Ленинские Горы, дом 1, строение 73, Москва, Россия  
chorbu.a@yandex.ru

Ряд 2-замещенных производных бензотиазола обладает противоопухолевой активностью, исследуется возможность клинического использования препаратов на их основе [1]. Известно также, что координационные соединения (КС) на основе бензотиазолов обладают большей противораковой селективностью и меньшей токсичностью, чем свободные лиганды. Ранее в лаборатории БАОС были исследованы комплексообразующие свойства замещенных тиогидантоинов, и показано, что они способны образовывать КС с медью в разных степенях окисления: как +1, так и +2 [2]. Мы ожидаем, что наличие в КС одновременно биологически активного бензотиазольного фрагмента и разнозаряженных атомов меди, позволит повысить его противораковую активность, а также проникающую способность через межклеточную мембрану.



В данном исследовании нами получены лиганды четырех структурных типов, содержащие бензотиазольный и тиогидантоиновый фрагменты, и исследованы в реакциях комплексообразования с хлоридом меди(II). Строение полученных КС было подтверждено спектральными и электрохимическими методами, а также данными элементного анализа.

Список литературы.

- [1] Gupta A., Rawat S. Synthesis and cyclization of benzothiazole // J. Curr. Pharm. Res. 2010. – Т. 3. – С. 13–23.  
[2] Krasnovskaya O. O. et al. Novel Copper-Containing Cytotoxic Agents Based on 2-Thioimidazolones // Journal of Medicinal Chemistry. – 2020. – Т. 63. – №. 21. – С. 13031-13063.

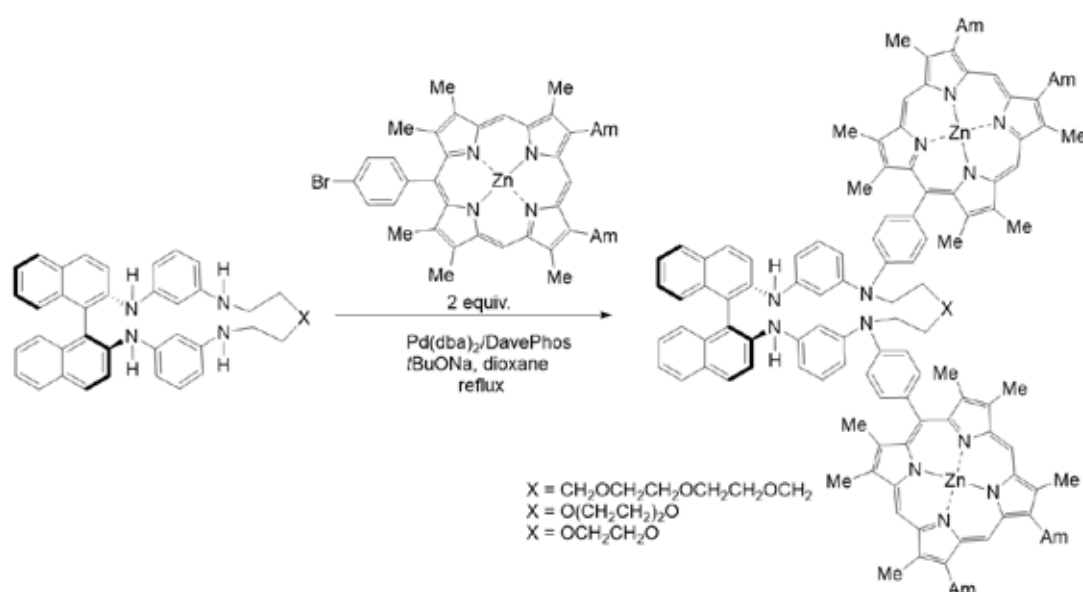
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 19-29-08007.

## Pd(0)-КАТАЛИЗИРУЕМОЕ ОБРАЗОВАНИЕ СВЯЗЕЙ С-N И С-O ДЛЯ МОДИФИКАЦИИ МАКРОЦИКЛОВ ФЛУОРОФОРНЫМИ ГРУППАМИ

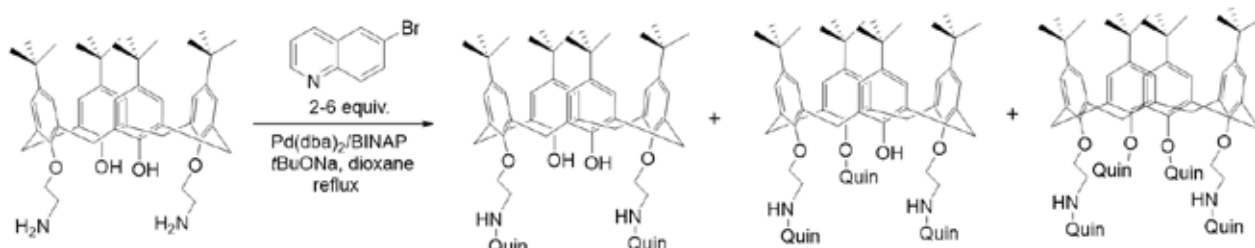
**Якушев А.А., Малышева А.С., Аверин А.Д., Белецкая И.П.**

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
Химический факультет, 119991, Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр.3,  
e-mail: longhauler@yandex.ru*

Использование палладий-катализируемого аминирования для введения в состав макроциклов флуорофорных групп с целью получения флуоресцентных хемосенсоров и молекулярных детекторов оказалось успешным для модификации хиральных диазидокса- и диазатриоксамакроциклов на основе (*S*)-2,2'-диамино-1,1'-бинафтила (БИНАМа) порфириновыми флуорофорами.



Взаимодействие диаминокаликс[4]арена с 6-бромхинолином в условиях палладиевого катализа приводит к продуктам *N*- и *O*-гетероарилации, при этом реакция по первичным аминогруппам идет быстрее, в связи с чем можно получить продукты, содержащие два, три и четыре хинолиновых фрагмента при варьировании соотношения реагентов. Синтезированные соединения исследованы в качестве флуоресцентных детекторов на катионы металлов, а в случае порфириносодержащих производных хиральных макроциклов изучена их возможность распознавания энантиомеров модельных аминокислот.



*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-03-00796.*



# ЗАОЧНОЕ УЧАСТИЕ



# CRYSTALLINE STRUCTURE OF THE COMPLEX Pd (II) WITH 4-AMINOANTHYPYRIN AND DIMETHYLSULPHOXIDE

**Abilova U.M., Hajiyeva S.R., Chiragov F.M.**

*Baku State University, Baku, Azerbaijan*

*e-mail: [u.abilova@mail.ru](mailto:u.abilova@mail.ru)*

In this report, the study of the palladium polydenole-ligand complex (II) was examined by X-ray structural method. A new palladium (II) complex was synthesized with 4-aminoantipyrine and dimethyl sulphoxide. X-ray diffraction analysis was carried out. The complexes were synthesized using known methods. The composition of the synthesized compounds was determined by thermogravimetric and elemental analysis. The single crystal was studied on a Bruker SMART APEX II CCD automatic diffractometer (MoK $\alpha$  radiation,  $\lambda = 0.71073$  Å, graphite monochromator,  $\varphi$  and  $\omega$  scanning). The molecular and crystal structure of this compound is established by the X-ray crystallography method. The study of the compound  $C_{13}H_{19}Cl_2N_3O_2SPd$  by the X-ray crystallography method showed that its crystal structure consists of discrete mononuclear complexes. The molecular structure of the complex is shown in Fig.1.

The palladium atom is surrounded by a single nitrogen atom (N3) belonging to 4-aminoantipyrine molecules, a sulfur atom (S1) belonging to dimethylsulfoxide molecules, and two chlorine atoms (Cl1 and Cl2) belonging to PdCl $_2$ , which take an equatorial position. The deviation of the palladium atom from the mid-plane of the atoms (Cl1, Cl2,) 2.0188 Å, (S1 and N3) is 2.2866 Å. Monoclinic crystals:  $a = 9.52$ ,  $b = 9.45$ ,  $c = 10.56$ ,  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 103.52^\circ$ ,  $\gamma = 90^\circ$ ,  $V = 924$  Å $^3$  As a result, a tetragonal pyramid is formed.

Thus, the X-ray diffraction analysis revealed that a stable complex was formed as a result of a synthesis aimed at obtaining a palladium-ligand complex of 4-aminoantipyrine and dimethyl sulfoxide.

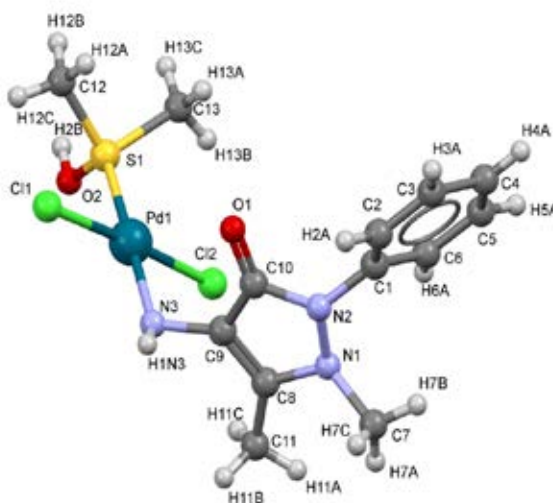


Fig. The molecular structure of the complex  $C_{13}H_{19}Cl_2N_3O_2SPd$

*This work was supported by the grant "50+50", BSU, Azerbaijan.*

## Biography

Abilova Ulviya.Murshud.-Ph.D., researcher of scientific laboratory "Ecological chemistry and environmental protection", Baku State University; Hajiyeva Sevinj Rafiq- doctor of science, professor, Baku State University; Chiragov Famil Musa- doctor of chemistry, professor of analytical chemistry, Baku State University.

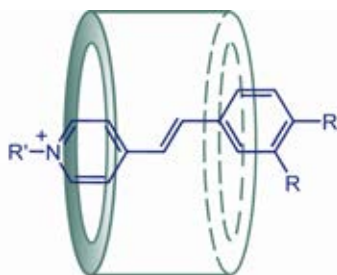
# ФОТОАКТИВНЫЕ ПСЕВДОРОТАКСАНОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ НА ОСНОВЕ СТИРИЛГЕТЕРОЦИКЛОВ И КАВИТАНДОВ

[Александрова Н.А.](#), Лобова Н.А., Ведерников А.И., Громов С.П.

Центр фотохимии РАН, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН,  
Москва, ул. Новаторов, 7А-1;  
e-mail: [11aha11@rambler.ru](mailto:11aha11@rambler.ru)

Краунсодержащие и метоксипроизводные стирилгетероциклов получены конденсацией метилгетероциклов с бензальдегидами в присутствии основания. Разработан синтез 18-краун-6-содержащего стирилпиридина конденсацией реагентов в среде  $As_2O$ .

Был разработан простой и эффективный способ синтеза краунсодержащих и метоксипроизводных гетарилфенилацетиленов рядов 4-пиридина и 4-хинолина. Соединения получены последовательными реакциями бромирования–дегидробромирования соответствующих стирилгетероциклов.



Комплексообразование стирилгетероциклов и пиридилфенилацетиленов с кавитандами –  $\beta$ -циклодекстринами и курбит[7]урилом - исследовали методами электронной и ЯМР  $^1H$ -спектроскопии. Были определены псевдоротахановое строение и устойчивость образующихся комплексов включения типа «гость–хозяин».

## Литература

1. Ведерников А. И и др., *Изв. АН Сер. хим.*, 2015, **64**, 2459.
2. Ведерников А. И и др., *Изв. АН Сер. хим.*, 2012, **61**, 148.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

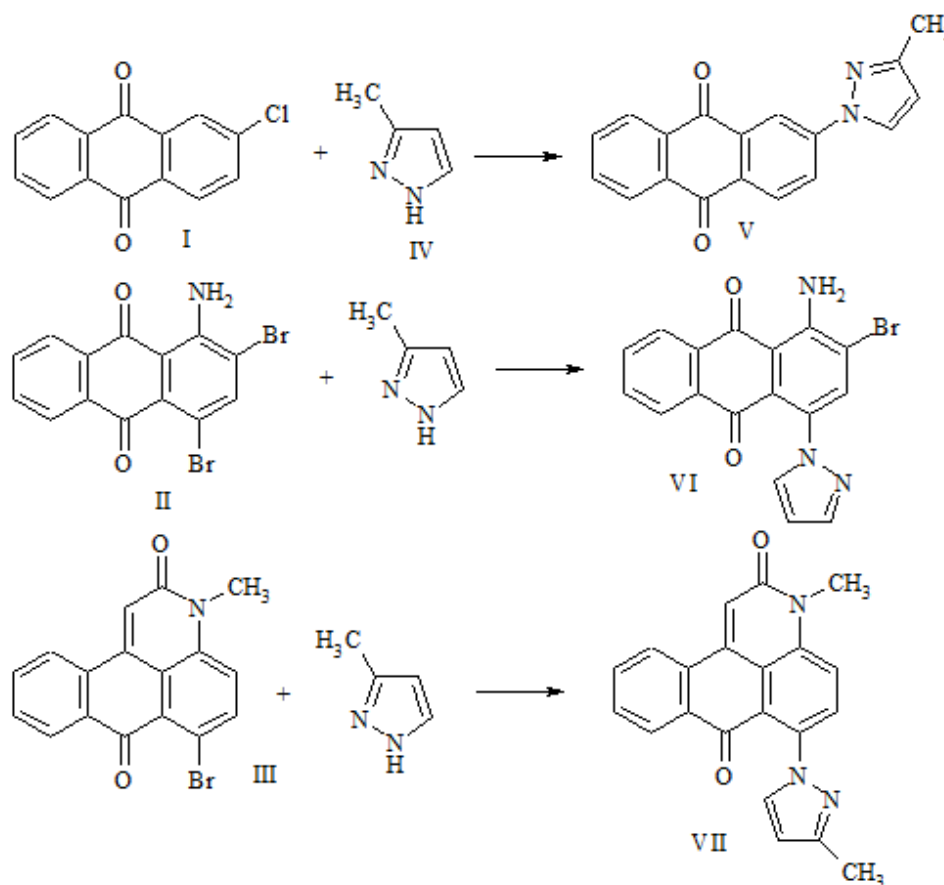


# СИНТЕЗ АРОМАТИЧЕСКИХ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ, СОДЕРЖАЩИХ ПИРАЗОЛИНОВЫЙ ФРАГМЕНТ

Анпёнова Е.П., Перевалов В.П.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,  
125047, Москва, Миусская площадь 9,  
e-mail: e.anpenova@yandex.ru*

*N*-Арилзамещённые пиразола могут быть использованы в качестве люминофоров<sup>1</sup>. Нами были получены моноарилзамещённые пиразола.



Все продукты реакции были выделены, очищены колоночной хроматографией и охарактеризованы спектральными методами.

Строения соединений V-VII было подтверждено данными ЯМР и масс-спектрами.

Подробно изучены ЭСП данных соединений. В случае соединения V после облучения УФ-светом обнаружено интенсивное жёлтое свечение.

## Литература

1. Красовицкий Б.М., Афанасиди Л.М. Моно- и бифлуорофоры. – Харьков: Ин-т монокристаллов, 2002. – 444с.

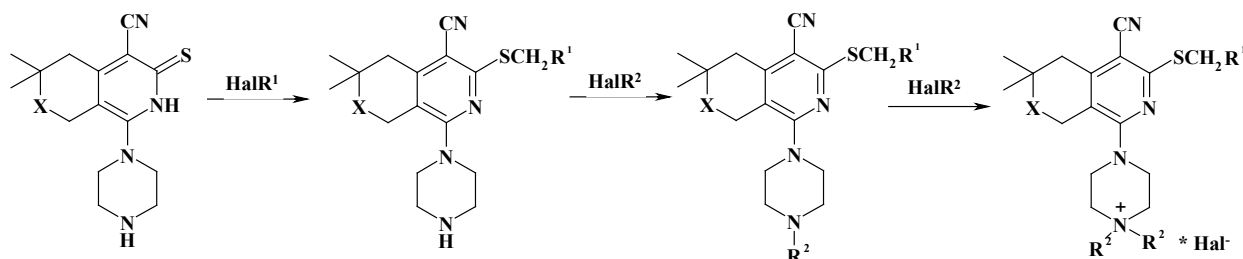
# СИНТЕЗ, ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПИПЕРАЗИН ЗАМЕЩЕННЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ПИРИДИНТИОНОВ

Арутюнян А.С.,<sup>а</sup> Шахатуни А.А.,<sup>а</sup> Унанян Л.С.,<sup>б</sup> Сакеян А.С.

<sup>а</sup>Научно-технологический центр органической и фармацевтической химии НАН Республики Армения, 0014, Ереван, пр. Азатутян, 26  
e-mail: harutyunyan\_arpi@mail.ru

<sup>б</sup>Российско-Армянский Университет, Институт Биомедицины и Фармации, 0051, Ереван, ул. О. Эмина, 123

Выбор в качестве объекта исследований функционально замещенных пиперазинов обусловлен широким спектром их биологической активности [1]. Основываясь на этом нами разработан метод получения тиоалкильных производных пиперазинзамещенных конденсированных пиридинов [2]. Далее осуществлено также замещение и в пиперазиновом кольце.



Проведено *in silico* исследование и выявлены некоторые закономерности между строением соединений и биологическими свойствами. А также были проведены антибактериальные исследования на основе данных молекулярного моделирования [3]. Производные пиперазинзамещенных пирано[3,4-с]пиридинов и тиено[2,3-б]пиридинов, подавляют рост грамположительных и грамотрицательных микроорганизмов. Антибактериальная активность была исследована на грамположительных стафилококках (*Staphylococcus aureus* 209p, 1) и грамотрицательных палочках (*Sh. Flexneri* 6858, *E. Coli* 0-55).

## Литература

1. Lockman J.W., Reeder M.D., Suzuki K., et. al., *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2010, **20**(7), 2283.
2. Paronikyan E. G., Mirzoyan G. V., Noravyan A. S., et. al., *Khim.-farm. Zh.*, 1993, **11**, 29.
3. Xia X. // *Curr. top. in med. chem.*, 2017, **17**(15), 1709.

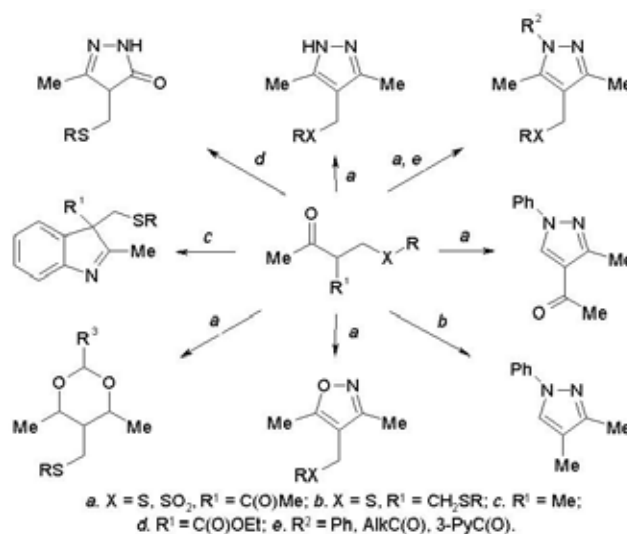
Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА в рамках научного проекта № 20TTSG-1D011 и № 20TTWS-1D049.

# СИНТЕЗ ГЕТЕРОЦИКЛОВ С АЛКИЛ(АРИЛ) СУЛЬФАНИЛМЕТИЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ

**Баева Л.А., Нугуманов Р.М., Бикташева Л.Ф.**

*Уфимский институт химии Уфимского федерального исследовательского центра РАН,  
450054, Уфа, проспект Октября 69,  
e-mail: sulfur@anrb.ru*

Алкил(арил)сульфанилметилзамещенные алкан-1,3-дионы и алкан-2-оны (b-меркаптокетоны), получаемые трехкомпонентным «зеленым» методом<sup>1,2,3</sup>, являются доступными прегетероциклическими соединениями и могут использоваться в синтезе функционализированных 1*H*-пиразолов, 3*H*-пиразол-3-онов, изоксазолов, 3*H*-индолов и 1,3-диоксанов.



Среди новых 3-(алкилсульфанилметил)изоксазолов, -3*H*-пиразол-3-онов и -1*H*-пиразолов найдены вещества, проявляющие антиоксидантную<sup>4</sup> и фунгицидную активность, а также свойства эффективных и высокоселективных экстрагентов и импрегнатов Pd(II)<sup>5,6,7</sup>.

## Литература

1. Баева Л.А., Бикташева Л.Ф., Фатыхов А.А., Ляпина Н.К. *Журн. орг. химии*, 2013, **49**, 1300.
2. Баева Л.А., Нугуманов Р.М., Бикташева Л.Ф., Нугуманов Т.Р., Фатыхов А.А. *Журн. орг. химии*, 2018, **55**, 531.
3. Баева Л.А., Бикташева Л.Ф., Фатыхов А.А., Ляпина Н.К. *Нефтехимия*, 2019, **59**, 788.
4. Якупова Л.Р., Баева Л.А., Сафиуллин Р.Л. *Кинетика и катализ*, 2021, **62**, 21.
5. Анпилогова Г.Р., Баева Л.А., Нугуманов Р.М., Фатыхов А.А., Муринов Ю.И. *Журн. неорг. химии*, 2018, **63**, 1065.
6. Анпилогова Г.Р., Баева Л.А., Нугуманов Р.М., Фатыхов А.А., Муринов Ю.И. *Журн. неорг. химии*, 2020, **65**, 104.
7. Анпилогова Г.Р., Баева Л.А., Муринов Ю. И. *Вестн. Башкир. ун-та*, 2020, **25**, 545.

*Работа выполнена по теме гос. задания (№ АААА-А19-119011790021-4).*

# СИНТЕЗ НОВЫХ ПИРИДО[3,2-В][1,4]БЕНЗОКСАЗИНОВ И БЕНЗОТИАЗИНОВ

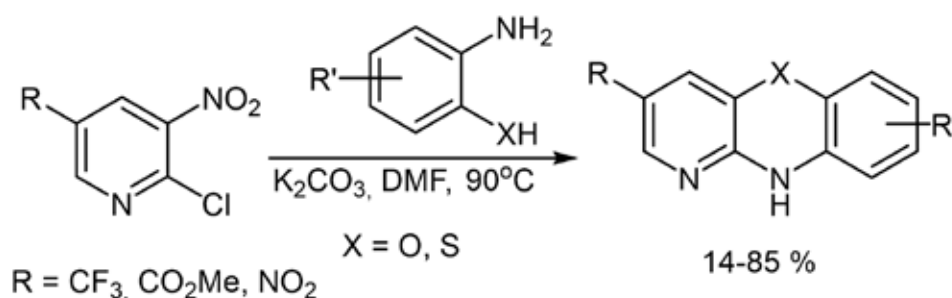
**Бастраков М.А.,<sup>а</sup> Старосотников А. М.,<sup>а</sup> Иванова В.В.,<sup>а</sup> Климова Т.А.,<sup>а</sup>**

<sup>а</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: b\_max82@mail.ru

Пиридо[3,2-*b*][1,4]бензоксазины и пиридо[3,2-*b*][1,4]бензотиазины представляют значительный интерес как в качестве основы для поиска новых фармакологически ориентированных соединений, так и с точки зрения разработки новых материалов с заданными свойствами<sup>1-4</sup>.

Ранее нами был разработан метод синтеза пиридо[3,2-*b*][1,4]бензоксазинов, а также дипиридо[2,3-*e*:3',2'-*b*][1,4]оксазина на основе реакций 3,5-динитро-2-хлорпиридина с различными *o*-аминофенолами.<sup>5</sup>

В настоящей работе на основе реакций замещенных 3-нитро-2-хлорпиридинов с *орто*-аминофенолами и *орто*-аминотиофенолами в присутствии основания синтезирован ряд новых пиридо[3,2-*b*][1,4]бензоксазинов и пиридо[3,2-*b*][1,4]бензотиазинов.



Показано, что наличие электрооакцепторного заместителя в положении 5 пиридинового цикла играет решающую роль при аннелировании оксазинового кольца. При этом в случае аминофенолов наилучший результат достигается при проведении реакций без выделения промежуточных продуктов замещения атома хлора. В случае аминотиофенолов образование пиридо[3,2-*b*][1,4]бензотиазинов протекает через перегруппировку Смайлса N,S-типа.

## Литература

1. Hsieh C.-J., Ferrie J. J., Xu K., Lee I., Graham T. J. A., Tu Z., Yu J., Dhavale D., Kotzbauer P., Petersson E. J., Mach R. H., *ACS Chem. Neurosci.*, 2018, **9**, 2521.
2. Li G., Zhang W., Xie Y., Li Y., Cao R., Zheng G., Huang N., Zhou Y., *J. Chem. Inf. Model.*, 2020, **60**, 3287.
3. Cortez-Maya S., Moreno-Herrera A., Palos I., Rivera G., *Curr. Med. Chem.*, 2020, **27**, 5403.
4. Azeh Engwa G., Lekem Ayuk E., Ujunwa Igbojekwe B., Unaegbu M., *Biochem. Res. Int.*, 2016, **2016**, art. no. 9896575.
5. Bastrakov M. A., Geraseva A. O., Starosotnikov A. M., Fedyanin I. V., Pavlov A. A., Ugrak B. I., Shevelev S. A., *Mendeleev Commun.*, 2016, **26**, 383.

## ПРИМЕНЕНИЕ СОРБЕНТА, СОДЕРЖАЩЕГО ФРАГМЕНТЫ О – ФЕНИЛЕН ДИАМИНА ДЛЯ КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ ТОРИЯ (IV)

Бахманова Ф.Н.

*Бакинский Государственный Университет  
e-mail: fidan\_chem@rambler.ru*

Предлагаемая методика основана на предварительном концентрировании тория (IV) из природных и промышленных объектов с применением полимерного хелатного сорбента, содержащего фрагменты о-фенилен диамина.

Использованы реактивы квалификации х.ч. Раствор тория ( $10^{-2}$  М) готовили растворением в дистиллированной воде точной навески его нитрата. Рабочие растворы получали разбавлением исходного. Необходимые значения pH поддерживали растворами HCl, NaOH и аммиачно-ацетатными буферными растворами. Для поддержания постоянной ионной силы использовали раствор KCl.

В качестве твердой фазы использовали сорбент, содержащий фрагменты о-фенилен диамина. Он представляет собой порошок белого цвета, не растворимый в воде, кислотах, слабых щелочах и органических растворителях. Для применения в анализе гранулы сорбента растирали в агатовой ступке и просеивали через сито (0,14 мм).

Кислотность раствора контролировали стеклянным электродом на pH-метре PHS-25. Оптическую плотность измеряли на фотокориметре КФК 2 ( $l=1$  см).

В представленной работе основное внимание было уделено изучению влияния на сорбцию тория(IV) pH среды, времени, ионной силы, концентрации ионов металла в растворе (Таблица).

Таблица. Основные показатели опытов статической сорбции.

СЕ, мг/г	pH <sub>opt</sub>	$\mu^*$ , мол/л	Время, час
387	4	1,4	2

\*- ионная сила приводящая к уменьшению сорбции

Исследована возможность и определены условия десорбции металла разными минеральными кислотами после концентрирования на предлагаемом сорбенте (HClO<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, HNO<sub>3</sub>, HCl) сорбента. Результаты анализа показали, что торий(IV) количественно десорбируется 2 М HCl. Возможно многократное использование регенерированного сорбента для концентрирования.

# КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ЦИНКА С ТРИПТОФАНОМ

**Бобоев М.У.**, <sup>а</sup> Рахимова М., <sup>а</sup> Суяров К.Дж., <sup>а</sup> Бобоев У.Х. <sup>б</sup>

<sup>а</sup> Химический факультет Таджикского национального университета,  
734025, Душанбе, проспект Рудаки, 17,  
e-mail: tuboshira09@mail.ru

<sup>б</sup> Кафедра органической и биологической химии,  
Бохтарского государственного университета им. Носири Хусрава

Изучение комплексообразования металлов с различными природными аминокислотами, содержащими донорные атомы О, N, является одним из наиболее перспективных и приоритетных направлений биоорганической, координационной, физической и неорганической химии. Координационные соединения d - элементов, входящие в состав сложных биоккомплексов относятся к числу важнейших координационных соединений. Триптофан - гетероциклическая аминокислота, в своей молекуле она содержит карбоксильную и аминогруппу. Комплексообразование цинка с этим лигандом изучено нами в водных растворах при температуре 303,16 К с использованием метода рН-метрического титрования и специальной компьютерной программы. Установлено, что в изученной системе образуются 4 комплексных соединения, их константы устойчивости рассчитаны с помощью функции образования Бьеррума (табл. 1). Кроме того, определены модельные параметры комплексов (область существования по шкале рН, максимальная степень накопления) [1, 2].

Таблица 1. Модельные параметры координационных соединений цинка с триптофаном при температуре 303,16 К, ионной силе раствора 0,1 и  $C_{Zn(II)}=0,01$ ;  $C_{Phe}=0,01$  моль/л в водном растворе

№ п/п	Состав комплекса	Область сущест. по шкале рН	Конст.образ., $\beta_{gslk}$	Максим.степень накоп., $\alpha$ , %	рН среды
1	$[Zn(HL)(H_2O)_3]^{2+}$	0,18-4,34	$2,07 \cdot 10^{11} \pm 0,015$	99,70	0,54
2	$[Zn(HL)_2(H_2O)_2]^{2+}$	0,22-10,12	$1,85 \cdot 10^{15} \pm 0,015$	100,00	5,00
3	$[ZnL(H_2O)_3]^+$	6,00-13,92	$1,09 \cdot 10^{12} \pm 0,015$	100,00	10,00
4	$[Zn(L)_2(H_2O)_2]^0$	9,92-13,92	$1,15 \cdot 10^{19} \pm 0,015$	98,64	13,52

## Литература

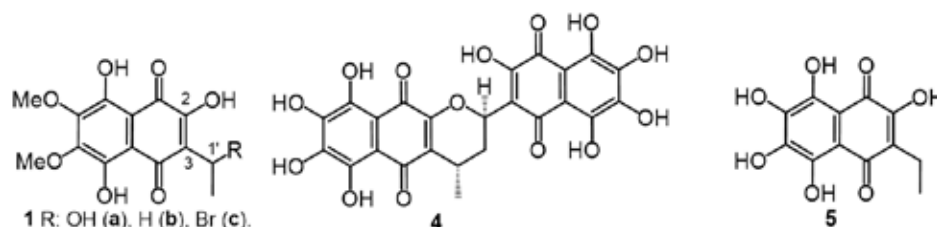
- Общие и комплексообразующие свойства изолейцина и триптофана. / Рахимова М., Файзуллаев Ф.Э., Бобоев М.У., Суяров К.Дж., Бобоев У.Х. // (Научная монография), ТНУ, Душанбе – 2020 115 с.
- Влияние температуры и природы среды на протолитические свойства триптофана / М. У. Бобоев, К. Дж. Суяров, М. Рахимова, Г. М. Бобиев // «Достижения современной биологии в Таджикистане». Материалы конференции. – Душанбе: 2016. - С. 22 - 26.

# СИНТЕЗ МЕЗОЦЕНТРОХИНОНА, МЕТАБОЛИТА МОРСКИХ ЕЖЕЙ *MESOCENTROTUS NUDUS* И *STRONGYLOCENTROTUS INTERMEDIUS*

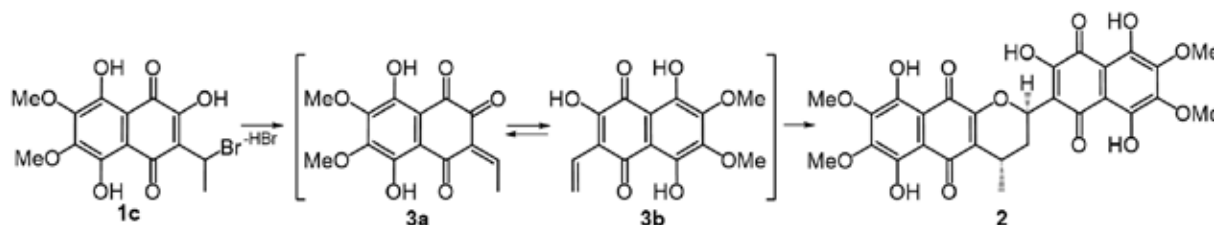
**Борисова К.Л., Мельман Г.И., Пелагеев Д.Н., Машнев Б.П., Ануфриев В.Ф.**

*Тихоокеанский институт биоорганической химии им. Г.Б. Елякова ДВО РАН,  
690022, г. Владивосток, пр. 100 лет Владивостоку, д. 159,  
e-mail: borisovaksenia@mail.ru*

Среди природных производных нафтазарина (5,8-дигидрокси-1,4-нафтохи-нона) нет примеров структур, одновременно содержащих в положении 2 и 3 гидроксид- и 1'-гидроксиалкильные заместители<sup>1</sup>. Попытка синтеза соединения типа **1a** бромированием субстрата **1b** и последующим гидролизом 1'-бромпроизводного **1c** уже на первой стадии привела к неожиданному результату.



Продуктом реакции явился 2-нафтохинонилбензо[*g*]хромендион **2**, образование которого вероятно протекает по механизму гетеродиеновой конденсации. 1'-Бромэтильное производное **1c** легко теряет HBr, давая енон **3a** (гетеродиен), который изомеризуется в соответствующий винилхинон **3b** (диенофил). Изомеризация **3a**→**3b** носит равновесный характер, поскольку после окончания реакции исходные диен или диенофил не обнаруживаются в смеси. Гидролиз бензо[*g*]хромендиона **2** дал продукт **4**.



Во время выполнения этого исследования в экстрактах морских ежей *Mesocentrotus nudus* и *Strongylocentrotus intermedius* методом ВЭЖХ-МС был обнаружен ранее неизвестный пигмент<sup>2</sup>, время удерживания, УФ- и масс-спектр которого совпали с данными соединения **4**. Таким образом, выделенный продукт, названный мезоцентрохиноном, является полигидроксилированным нафтохинонилбензо[*g*]хромендионом, димером эхинохрома (**5**), одного из пигментов морских ежей<sup>1</sup>.

## Литература

1. Thomson R.H. *Naturally occurring quinones*, 2nd ed., 1971. 3rd ed., 1987. 4th ed., 1997.
2. Vasileva E.A., Mishchenko N.P., Tran V.T.T., Vo H.M.N., Fedoreyev S.A. *Mar. Drugs* **2021**, 19, 21.

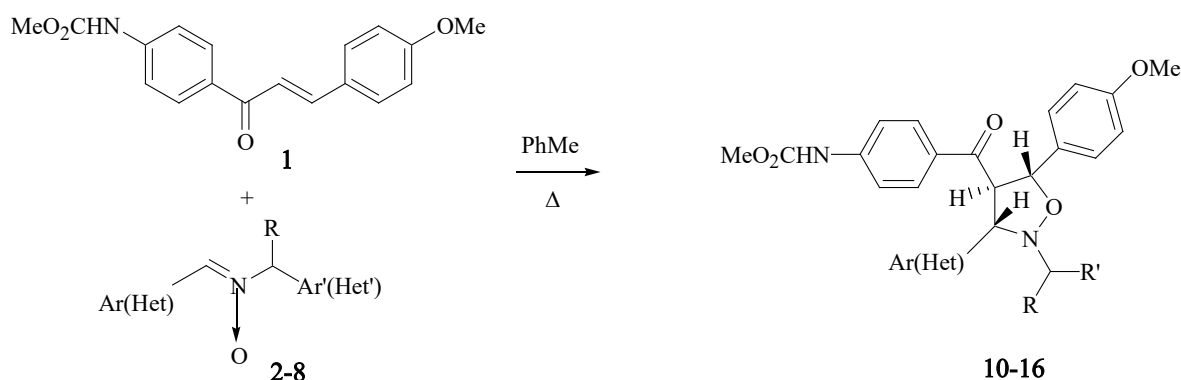
# СИНТЕЗ НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНО ЗАМЕЩЕННЫХ ИЗОКСАЗОЛИДИНОВ

Великородов А.В.,<sup>а</sup> Кутлалиева Э.Н.,<sup>а</sup> Шустова Е.А.<sup>б</sup>

<sup>а</sup>Астраханский государственный университет,  
414000, Астрахань, пл. Шаумяна, 1,  
e-mail: org@asu.edu.ru

<sup>б</sup>Астраханский государственный медицинский университет,  
414000, Астрахань, ул. Бакинская, 121

Халконы являются ключевыми соединениями в синтезе разнообразных гетероциклических соединений [1,2]. Установлено, что циклоприсоединение к метил {[4-[(2E)-3-(4-метоксифенил)проп-2-еноил]фенил}карбамату (**1**) нитронов (**2-8**) протекает регионаправленно, диастереоселективно и приводит к получению соответствующих 2,3,4,5-тетразамещенных изоксазолидинов (**10-16**) с высокими (85-90%) выходами.



Ar=Ph, R=3-бутен-1-ил, R'=2-тиен-1-ил (**2,10**); Ar=Ph, R=R'=1-аллилциклогексил (**3,11**); Ar=Ph, R=3-бутен-1-ил, 4-пиридин-1-ил (**4,12**); Ar=Ph, R=3-бутен-1-ил, R'=1-(4-метоксифенил) (**5,13**); Ar= 2-фуран-1-ил, R=3-бутен-1-ил, R'=2-тиен-1-ил (**6,14**); Ar=Ph, R=3-бутен-1-ил, R'=Ph (**7,15**); Ar=Ph, R=R'=i-Pr (**8,16**).

Строение синтезированных соединений подтверждено методами ИК, ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, спектроскопии, включая методики COSY, NOESY и HMBC. В спектре COSY соединения **10** присутствует кросс-пик дублетного сигнала протона H<sup>3</sup> (δ 5.60 м.д.) с сигналом атома C<sup>3</sup> (δ 72.2 м.д.). Дублетный сигнал протона H<sup>5</sup> (δ 5.30 м.д.) и дублет дублетный сигнал протона H<sup>4</sup> имеют соответственно кросс-пики с сигналами атома C<sup>4</sup> (δ 86.1 м.д.) и атома C<sup>5</sup> (δ 69.0 м.д.). В спектре HMBC наблюдается кросс-пик протона H<sup>3</sup> (δ 5.60 м.д.) с атомом углерода карбонильной группы (δ 197.7 м.д.), что свидетельствует в пользу указанной региохимии.

## Литература

1. Великородов А.В., Степкина Н.Н. *ЖОрХ*, 2016, **52**, 1797.
2. Chiacchio M.A., Giofrè S.V., Romeo R., Romeo G., Chiacchio U. *Curr.Org.Synth.*, 2016, **13**, 726.

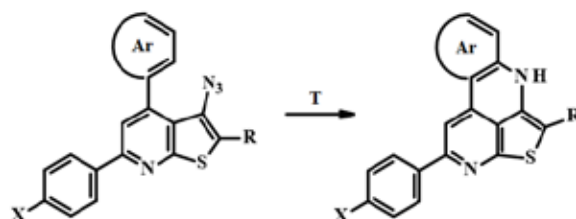


## НЕОБЫЧНАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА *перу-* АННЕЛИРОВАННЫХ БЕНЗО[С]ТИЕНО-2,7- НАФТИРИДИНОВ

**Василин В.К., Канищева Е.А., Строганова Т.А., Крапивин Г.Д.**

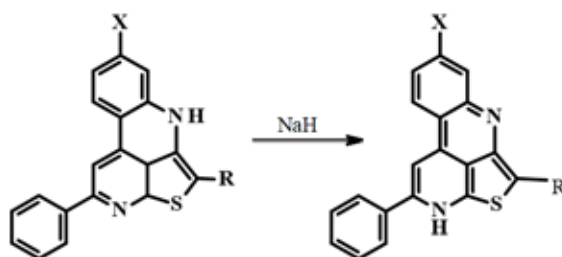
*Кубанский государственный технологический университет,  
350072, г. Краснодар, ул. Московская, 2  
e-mail: vasvk@mail.ru*

В рамках исследования термолита производных 3-азидотиено[2,3-*b*]пиридина как метода формирования полиядерных гетероциклических систем, содержащих тиенопиридиновый каркас, нами получены представители новой неописанной в литературе гетероциклической системы - бензо(фуро,тиено)тиено[2,3,4-*ij*]-2,7-нафтиридина.



При изучении реакций алкилирования полученных нафтиридинов галогеналканами мы обнаружили интересную перегруппировку этих соединений под действием основания, приводящую к образованию более стабильного таутомера.

Нами осуществлен эксперимент по превращению 6-Н изомеров 2,7-нафтиридинов в их таутомерные формы при взаимодействии с гидридом натрия в безводном диоксане. В качестве продукта реакции с выходом от 57 до 67 % выделены 3*H*-бензо[с]тиено[2,3,4-*ij*]-2,7-нафтиридины.



Предложен механизм возможный превращений.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект FZEZ-2020-0004).*

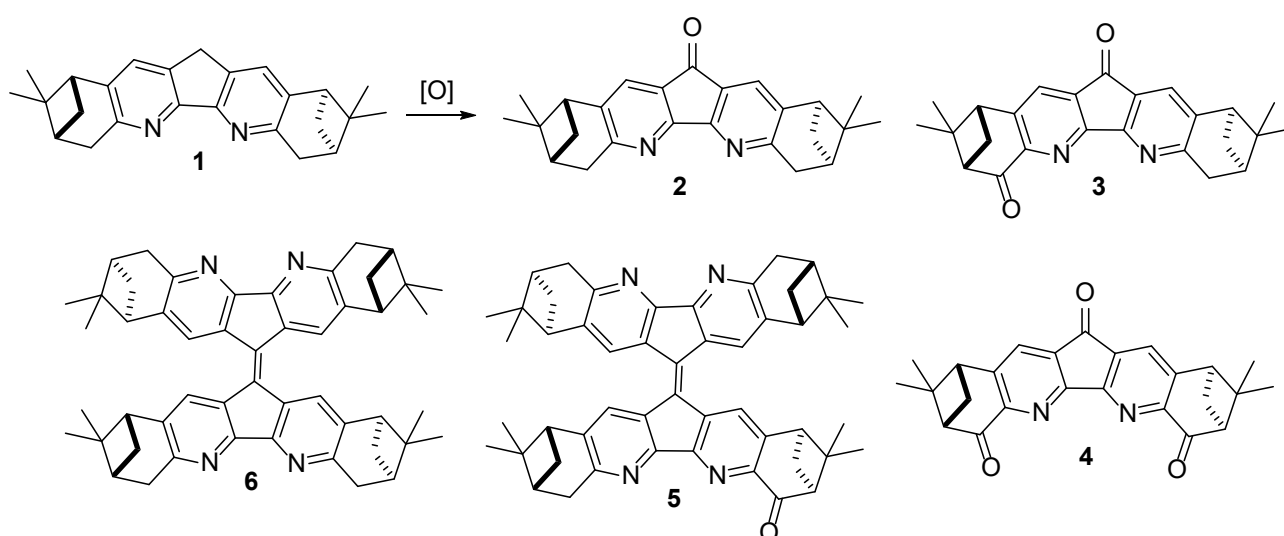
# ОКИСЛЕНИЕ НОПИНАН-АННЕЛИРОВАННОГО 4,5-ДИАЗАФЛУОРЕНА

**Васильев Е.С.,<sup>а</sup> Бизяев С.Н.,<sup>а</sup> Кокина Т.Е.,<sup>б</sup> Ткачёв А.В.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup>Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН,  
630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, д.9  
e-mail: Vasilyev@nioch.nsc.ru

<sup>б</sup>Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,  
630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, д.3

4,5-Диазафлуореновые производные вызывают интерес в координационной химии как ближайшие аналоги 2,2'-бипиридов и 1,10-фенантролинов<sup>1</sup>. Нопинан-аннелированный 4,5-диазафлуорен **1** является одним из лигандов такого типа.<sup>2</sup>



Мы изучили окисление хирального 4,5-диазафлуорена **1** двумя системами: 1) диоксидом селена в диоксане, 2) триоксидом хрома в пиридине.

Получены кетоны **2-4** и димерные продукты **5** и **6**. Показано, что первая система приводит преимущественно к продуктам **2** (38%), **5** (5%), **6** (30%), вторая к продуктам **2** (40%), **3** (10%), **4** (10%). С некоторыми из продуктов получены комплексные соединения с  $Zn^{2+}$ ,  $Cd^{2+}$ ,  $Ag^+$  стехиометрии 1:1.

## Литература

1. Annibale V.T., Song D. *Dalton Trans*, 2016, 32
2. Vasilyev E.S., Bizyaev S.N., Komarov V.Yu., Tkachev A.V. *Tetrahedron*, 2021, 131979

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 18-73-00148.

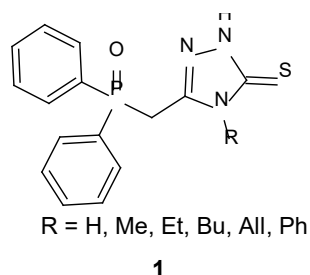
## ФОСФОРСОДЕРЖАЩИЕ 1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТИОНЫ. СИНТЕЗ. СВОЙСТВА.

**Гаврилова Е.Л.,<sup>a</sup> Крутов И.А.,<sup>a</sup> Бурангулова Р.Н.,<sup>a</sup> Исаева А.О.,<sup>a</sup>  
Самигуллина А.И.<sup>b</sup>, Губайдуллин А.Т.<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия  
420015, Россия, г. Казань, ул. К.Маркса, д. 68.

<sup>b</sup>Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр Российской академии наук», Казань, Россия, 420088, Россия, г. Казань, ул. Арбузова, д. 8

Триазолы и их производные хорошо известны в ряду биологически активных соединений, обладающих широким спектром фармакологической активности<sup>1,2</sup>. Нами разработан препаративный метод синтеза новых фосфорсодержащих 1,2,4-триазол-3-тионов **1** гетероциклизацией соответствующих фосфорилированных тиосемикарбазидов, полученных на основе гидразида дифенилфосфорилуксусной кислоты<sup>3</sup>.



Найдено, что природа заместителя у 4N-атома триазолтионного цикла влияет на равновесие таутомерных форм: триазолтионной и триазолтиольной. Наличие двух нуклеофильных центров позволяет модифицировать цикл либо по S- либо по 2N- атомам. Осуществлена S- и N- функционализация фосфорилированных 1,2,4-триазол-3-тионов: S-алкилированием этилбромацетатом, N-аминометилированием морфолином по Манниху, N- и S- присоединением этилакрилата по Михаэлю. Установлено, что присоединение этилакрилата протекает либо по N-, либо по S- атому в зависимости от строения триазолтионного цикла. Строение ряда фосфорилированных тиосемикарбазидов и производных 1,2,4-триазол-3-тионов **1** доказано методом РСА.

### Литература

1. Küçükgülzel Ş.G., Çıkla-Süzgün P. *Eur. J. Med. Chem.*, 2015, **97**, 830.
2. Ayati A., Emami S., Foroumadi A. *Eur. J. Med. Chem.*, 2016, **109**, 380.
3. Гаврилова Е.Л., Крутов И.А., Валиева А.А., Хаяров Х.Р., Самигуллина А.И., Губайдуллин А.Т., Шаталова Н.И., Бурангулова Р.Н., Синяшин О.Г. *ЖОХ*, 2018, **11**, 1789.

# СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИМИКРОБНОЙ АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ КРАУН-ЭФИРОВ И ИХ МЕДНЫХ КОМПЛЕКСОВ

[Глушко В.Н.](#),<sup>а</sup> Садовская Н.Ю.,<sup>а</sup> Блохина Л.И.,<sup>а</sup> Жила М.Ю.,<sup>б</sup> Белусь С.К.,<sup>а</sup>  
Ретивов В.М.,<sup>а</sup> Чердынцева Т.А.<sup>в</sup>

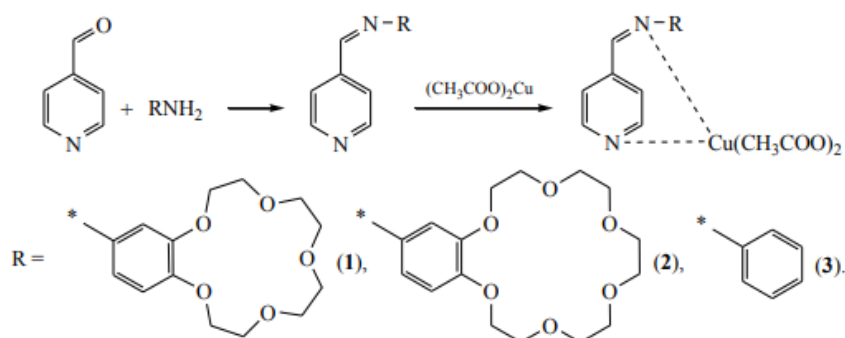
<sup>а</sup>НИЦ «Курчатовский институт» ИРЕА,  
107076, Москва, Богородский вал, 3  
e-mail: sadovskaya-n@mail.ru

<sup>б</sup>ФГУП «ГНЦ «НИОПИК», 141701, Долгопрудный, Лихачевский проезд, 7

<sup>в</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова, 119192, Москва, ул. Колмогорова, 1, стр. 73

Способность патогенных микроорганизмов к развитию резистентности к разного рода антибиотикам и дезинфицирующим средствам диктует условия постоянного поиска новых антибактериальных средств. Активно ведутся исследования биологического и медицинского потенциала оснований Шиффа, производных краун-эфиров и их комплексов с металлами, которые как ионофоры могут проявлять антибактериальную, противогрибковую и противоопухолевую активность [1].

В работе впервые синтезированы основания Шиффа, производные бензо-15-краун-5, бензо-18-краун-6 и их медные комплексы, исследована их антибактериальная активность. Выявлено, что все соединения проявляют активность против грамположительных бактерий *Micrococcus luteus* и *Staphylococcus aureus*. Грамотрицательные бактерии не проявляют роста в средах медных комплексов производных краун-эфиров. Для оснований Шиффа, производных краун-эфиров установлен спад активности в ряду при повышении молекулярной массы соединений.



## Литература

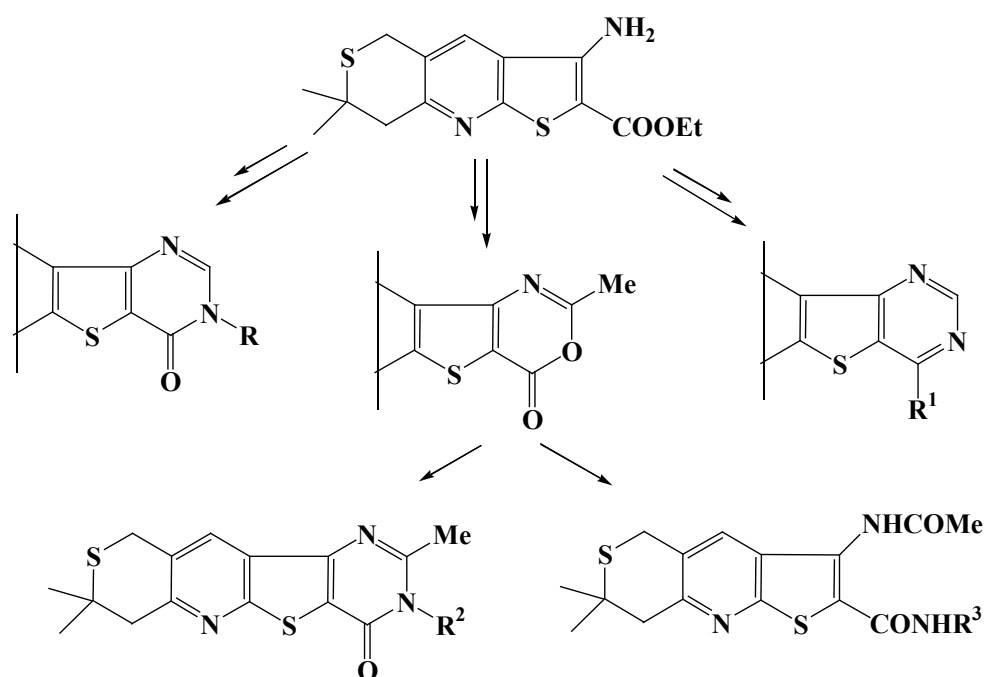
1. Садовская Н.Ю., Глушко В.Н., Блохина Л.И., Ретивов В.М. *Химическая безопасность*, 2020, **4** (2), 80-100.

# СИНТЕЗ НОВЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ПРЕДСТАВИТЕЛЕЙ ТИЕНО[2,3-В]ТИОПИРАНО[3,4-Е] ПИРИДИНА

Дабаева В.В., Багдасарян М.Р.

Научно-технологический центр органической и фармацевтической химии НАН Республики Армения,  
0014, Ереван, пр. Азатутян, 26  
e-mail: valya.dabayeva@mail.ru

Продолжение исследования по выяснению влияния структурных особенностей производных конденсированных тиено[2,3-б]пиримидинов на их биологическую активность, а также с учетом выявленной нами ранее их биологической активности [1-3] разработаны методы синтезов соответствующих производных, содержащих тиопирановое кольцо.



## Литература

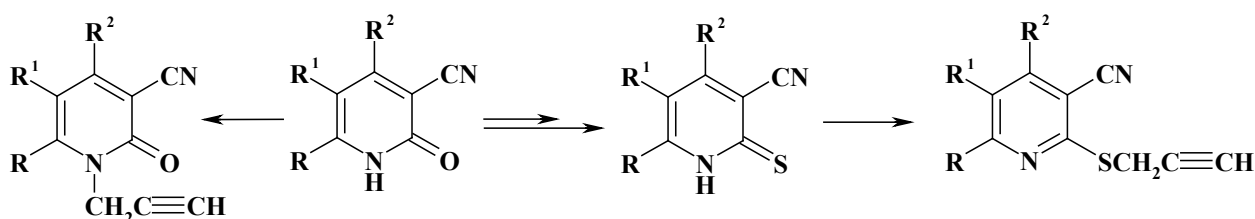
1. Дабаева В.В., Багдасарян М.Р., Норавян А.С., Джагацпанян И.А., Назарян М.М., Акопян А.Г. *Хим.-фарм. ж.*, 2015, **49(9)**, 17.
2. Дабаева В.В., Багдасарян М.Р., Норавян А.С., Джагацпанян И.А., Назарян М.М., Акопян А.Г., Тадевосян А.А. *Хим.-фарм. ж.*, 2013, **47(3)**, 12.
3. Дабаева В.В., Багдасарян М. Р., Пароникян Е.Г., Дашян Ш.Ш., Пароникян Р.Г., Назарян М.М., Акопян А.Г. *Хим.-фарм. ж.*, 2020, **54(7)**, 27.

# СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ НОВЫХ МОНО- И БИЦИКЛИЧЕСКИХ N-/S-ПРОПАРГИЛ ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДИНА

[Дашян Ш.Ш.](#), Балян К.В., Айвазян А.Г.

Научно-технологический центр органической и фармацевтической химии НАН Республики Армения,  
0014, Ереван, пр. Азатулян, 26  
e-mail: shdashyan@gmail.com

На основании того, что пиридин и его конденсированные производные входят в состав разнообразных эффективных лекарственных средств [1-3], на основе функционально замещенных моно- и бициклических производных пиридина нами осуществлен синтез новых представителей N-/S-пропаргил замещенных производных пиридина. Взаимодействием моно- и бициклических производных пиридинона с пропаргилбромидом были синтезированы соответствующие N-пропаргилзамещенные пиридина, а реакция с хлорокисью фосфора привела к хлор производным. Дальнейшее замещение атома хлора пропаргилбромидом привело к образованию терминальных тиоацетиленовых соединений. Строение полученных соединений подтверждено физико химическими методами анализа. Исследовано поведение N-/S-пропаргил замещенных производных пиридина в реакциях с СН кислотами.



## Литература

1. Paronikyan E. G., Petrou A., Fesatidou M., Geronikaki A., Dashyan Sh. Sh., Mamyan S. S., Paronikyan R. G., Nazaryan I. M., Hakopyan H. H. *Med. Chem. Commun.*, 2019, **10**, p. 1399
2. Weyesa A., Mulugeta E. *RSC Advances*, 2020, **10**, 20784
3. Alizadeh S. R., Ebrahimzadeh M. A. *Mini Rev. Med. Chem.* 2021, doi. 10.2174/1389557521666210126143558

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА в рамках научного проекта № 20TTWS-1D032

# КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ МАРГАНЦА(II) НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПОЛИПИРИДИНОВ И 5-ФЕНИЛТЕТРАЗОЛА: СИНТЕЗ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ

Ермакова Е.А.,<sup>а,б,в</sup> Еремина Ю.А.,<sup>а,б,в</sup> Лидер Е.В.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup> *Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,  
630090, Новосибирск, пр. Лаврентьева 3*

<sup>б</sup> *Новосибирский национальный исследовательский государственный университет,  
630090, Новосибирск, ул. Пирогова 1*

<sup>в</sup> *Научно-исследовательский институт молекулярной биологии и биофизики –  
структурное подразделение ФИЦ ФТМ, 630117, Новосибирск, ул. Тимакова, 2/12  
e-mail: ermakova2299@gmail.com*

Тетразолы являются структурными фрагментами физиологически активных соединений, в том числе лекарственных средств. На данный момент известно около 20 видов биологической активности, которые могут проявлять соединения, содержащие тетразольный фрагмент (противогрибковая, противовирусная, противовоспалительная, антиоксидантная активность и т.д.). Возможность использования тетразолов в качестве потенциальных противоопухолевых средств также является перспективным направлением. Так как в комплексных соединениях свойства лигандов, как правило, усиливаются, то синтез комплексов эндогенных металлов с производными тетразола и изучение их биологических свойств является актуальной задачей.

В рамках работы синтезированы и охарактеризованы следующие соединения:  $[\text{Mn}_3(\text{bipy}/\text{phen})_2\text{L}_4(\text{OAc})_2]$  (**1**, **2**),  $[\text{Mn}_2(\text{dmbipy})_2\text{L}_2(\text{OAc})_2]$  (**3**) и  $[\text{Mn}(\text{dmphen})_2\text{L}_2]$  (**4**), где bipy – 2,2'-бипиридин, phen – 1,10-фенантролин, dmbipy – 4,4'-диметил-2,2'-бипиридин, dmphen – 4,7-диметил-1,10-фенантролин, L – 5-фенилтетразолат анион. Методом рентгеноструктурного анализа определены молекулярные и кристаллические структуры всех синтезированных комплексов. Изучены биологические свойства данных соединений (цитотоксическая, противомикробная и антиоксидантная активность). Исследование цитотоксической активности лигандов и комплексных соединений проводилось на клеточных линиях Hep2 (карцинома гортани) и HepG-2 (гепатоцеллюлярная карцинома). Среди исследованных комплексов наибольшей цитотоксичностью обладает соединение **4** – параметр  $\text{IC}_{50}$  для него на клеточных линиях Hep2 и HepG-2 составляет  $8,1 \pm 1,2$  мкМ и  $5,7 \pm 0,6$  мкМ соответственно. Для изучения антиоксидантной активности лигандов и полученных смешаннолигандных комплексов *in vitro* использовали стабильный радикал 2,2'-азино-бис-(3-этилбензотиазолин-6-сульфоновую кислоту) (ABTS<sup>+</sup>). Наиболее выраженную активность имеет комплекс **1** ( $\text{IC}_{50} = 37$  мкМ).

*Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 20-73-10207).*

# КОМПЛЕКСЫ РАЗЛИЧНЫХ ОКСИФОСФОНАТОВ С ИОНАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

**Жаркынбек Т.Е.,<sup>а,б</sup> Тен А.Ю.,<sup>а</sup> Ю В.К.<sup>а</sup>**

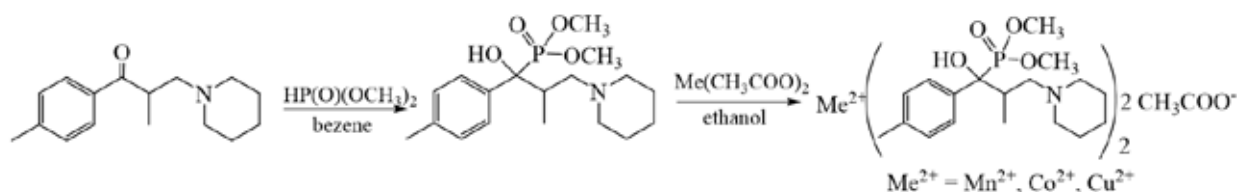
<sup>а</sup>Институт химических наук им. А.Б. Бектурова,  
050010, Алматы, ул. Ш. Валиханова, 106,  
e-mail: tolganay.zharkynbek@gmail.com

<sup>б</sup>Казахский национальный университет им. аль-Фараби,  
050040, Алматы, пр. аль-Фараби, 71

$\alpha$ -Окси- и  $\alpha$ -аминофосфонаты гетероциклического ряда и их производные, благодаря широкому спектру биологических свойств, применяются в медицине и сельском хозяйстве<sup>1</sup>. Для повышения биоэффективности гетероциклических соединений широко используются их комплексы с ионами различных металлов<sup>2</sup>.

Ранее нами на примере пиперидинооксифосфоната доказано, что образование комплексных соединений происходит путем формирования двух координационных связей:  $Me^{2+}-N$  и  $Me^{2+} \dots O=P^3$ . Для изучения влияния количества координационных центров на биологическую активность синтезированы металлокомплексы оксифосфонатов на основе циклогексанона и ацетона состава металл:лиганд = 1:2.

Следующим лигандом стал оксифосфонат с двумя координационными центрами, полученный на основе толперизона<sup>4</sup> – миорелаксанта центрального действия, в условиях реакции Абрамова.



Лиганд образует комплексы с ацетатами ионов  $Me^{2+}$  состава 2:1 в этаноле при 25°C и ультразвуковом промотировании. Данные ИК спектров подтверждают участие фосфонатной группы и азота в комплексообразовании, однако окончательная точка в строении комплекса еще не поставлена.

## Литература

1. Джембаев Б.Ж.  $\alpha$ -окси и  $\alpha$ -аминофосфонаты шестичленных (N, O, S, Se) гетероциклов. – Алматы: Комплекс, 2003. – 234 с.
2. Noffke A.L., Habtemariam A., Pizarro A.M., Sadler P.J. *Chem. Commun.*, 2012, **48**, 5219-5246.
3. Жаркынбек Т.Е., Кыстаубаева Н.У., Малмакова А.Е., Фасхутдинов М.Ф., Пралиев К.Д., Ю В.К. *Хим. журн. Казахстана*, 2020, **70**, 180-188.
4. Orgovan G., Tihanyi K., Noszal B. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 2009, **50**, 718-723.

Работа выполнена при финансовой поддержке КН МОН РК, грант АР 08856051.



# КОНЬЮГАТЫ ПИРОФЕОФОРБИДА А СО СТЕРЕОИДАМИ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫЕ АГЕНТЫ

**Золотцев В.А.**,<sup>а,б</sup> Рубанов З.М.,<sup>а</sup> Морозевич Г.Е.,<sup>а</sup> Мехтиев А.Р.,<sup>а</sup> Новиков Р.А.,<sup>в</sup>  
Мишарин А.Ю.,<sup>а</sup> Пономарев Г.В.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> *Институт биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича, 119435, Москва, ул. Погодинская, 10/8  
e-mail: vazolottsev@mail.ru*

<sup>б</sup> *Российский университет дружбы народов, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6*

<sup>в</sup> *Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта Российской академии наук,  
119991, Москва, ул. Вавилова, 32.*

Конъюгирование тетрапиррольных макроциклов с различными биологически активными соединениями является перспективным подходом к созданию новых фотосенсибилизаторов, обладающих повышенным средством и специфичностью к выбранным биомишеням.

Целью данного исследования был поиск новых би- и полифункциональных молекул, обладающих высоким средством к клеткам карциномы простаты и проявляющих значительную антипролиферативную активность и фотоиндуцированную цитотоксичность в вышеупомянутых клетках.

Была синтезирована серия из десяти бифункциональных конъюгатов пиррофеофорбида а с производными дигидротестостерона, тестостерона, эпитестостерона и секо-D-андростана, связанных между собой линкерами различной природы. Выявлено взаимное влияние стероидного и макроциклического фрагмента методами ЯМР-спектроскопии, построены молекулярные модели конъюгатов, исследована антипролиферативная активность и фотоиндуцированная цитотоксичность в клетках карциномы простаты LNCaP и PC-3.

Были синтезированы два новых комплексных конъюгата, содержащие в своем составе три функциональных фрагмента: пиррофеофорбид а, 17 $\alpha$ -замещенный тестостерон и липофильную гексадецильную цепь, связанные между собой линкером на основе L-лизина. Исследована антипролиферативная активность конъюгатов в клетках карциномы простаты LNCaP и PC-3. Конъюгаты легко образовывали смешанные мицеллы с фосфатидилхолином и плуроником F68. Исследована интернализация полученных мицелл клетками гепатокарциномы HepG2 и клетками карциномы простаты LNCaP и PC-3.

*Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований в Российской Федерации на долгосрочный период (2021 - 2030 годы)*

# (3-(1H-ИМИДАЗОЛ-1-ИЛ)ПРОПИЛ)КАРБАМОДИТИОНАТЫ

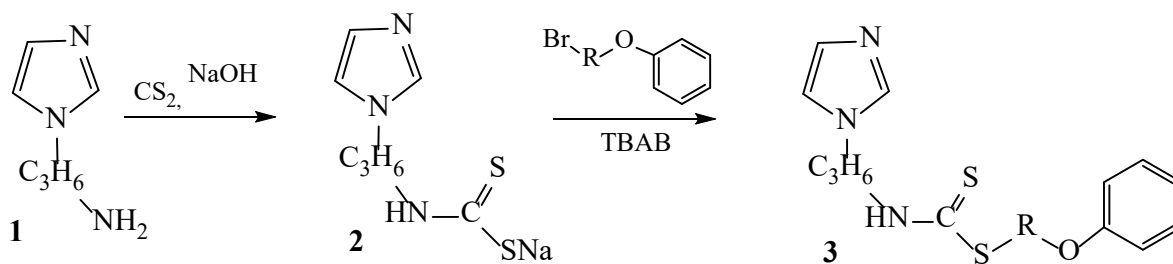
Калдыбаева А.Б.,<sup>а,б</sup> Малмакова А.Е.,<sup>а</sup> Муканова М.С.,<sup>а</sup> Ю В.К.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>АО «Институт химических наук им. А.Б.Бектурова»,  
ул. Ш. Валиханова 106, Алматы, Казахстан, 050010,  
altin\_28.94@mail.ru

<sup>б</sup>НАО «Казахский национальный женский педагогический университет»,  
ул. Гоголя 114 к1, Алматы, Казахстан, 050000

Некоторые производные дитиокарбоновых кислот является ускорителями вулканизации каучуков<sup>1</sup>, флотореагентами<sup>2</sup>, радиопротекторами<sup>3</sup> и аналитическими реагентами<sup>4</sup>. Они также обладают полезными биологическими действиями такими, как инсектициды, акарициды, нематоциды, фунгициды и т.д.<sup>5</sup>

С целью получения потенциальных противоиных препаратов, а также радиопротекторов синтезированы новые эфиры (3) с имидазолпропильным фрагментом при комнатной температуре смешиванием смеси (3-(1H-имидазол-1-ил)карбамодинат натрия (2), феноксиалкилбромида в присутствии каталитических количеств тетрабутиламоний бромида. Исходный карбамодинат натрия (2) с количественным выходом получен взаимодействием 3-(1H-имидазол-1-ил)пропиламина с сероуглеродом и гидроксида натрия.



Выход полученных эфиров составляет 23-75%. Структура синтезированных соединений подтверждены элементарным анализом и спектральными данными таких, как ИК и спектроскопии ЯМР.

## Литература

1. Блох Г.А. *Органические ускорители вулканизации и вулканизирующие системы эластомеров*. Л.: Химия, 1978, 56 с.
2. Патент США №3787471, 1974.
3. Barnes J.H., Esslemont G., Holt P. *Macromol. Chem.*, 1975, 176, №2, p. 275-283.
4. Фритц Д., Шенк Г. *Количественный анализ*. М.: Мир, 1978, 83 с.
5. Собенина Л.Н., Михалева А.И., Трофимов Б.А. *Пирролкарбаодитионаты: синтез и реакции*. Рос.хим.ж., 2005, №6, с. 97-108.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках грантового финансирования, грант АР 08856051

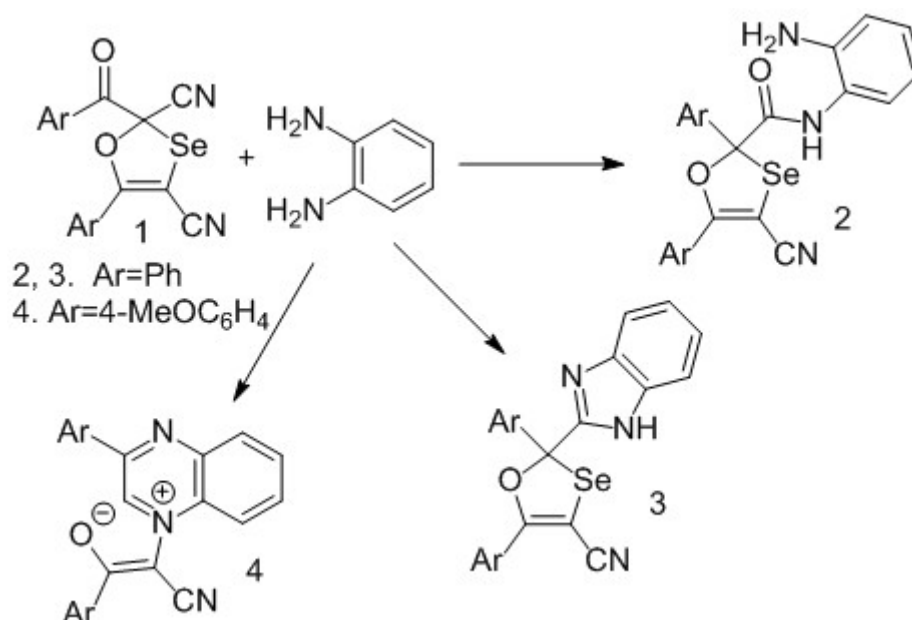
# ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 2-ЦИАНОСОДЕРЖАЩИХ ОКСАСЕЛЕНОЛОВ-1,3 С О-ФЕНИЛЕНДИАМИНОМ

**Качанов А.В.,** Замараев А.В., Каминский В.А.

Дальневосточный федеральный университет,  
690922, Владивосток, о.Русский, п. Аякс 10,  
e-mail: kachanov.av@dyfu.ru

Оксаселенолы-1,3 являются редкими и малоизученными соединениями. Недавно найденный нами способ получения 2-цианосодержащих оксаселенолов-1,3 на основе ароилацетонитрилов сделал их более доступными<sup>1</sup>.

Продолжая исследование свойств 2-цианосодержащих оксаселенолов-1,3 мы обнаружили возможность построения более сложных гетероциклических соединений на их основе. Взаимодействие с о-фенилендиамином, в зависимости от полярности растворителя, приводит к образованию производных нуклеофильного замещения цианогруппы с миграцией арила (2), продуктов их дальнейшей гетероциклизации (3) или хиноксалиниевого бетаина (4).



Соединения (2) и (3) образуются в нормальных условиях, соединение (4) получается при нагревании.

Строение полученных соединений подтверждено данными ИК спектроскопии, данными ЯМР и масс-спектрометрии.

## Литература

1. Качанов А.В., Замараев А.В., Герасименко А.В., Маслов К.В., Слабко О.Ю., Каминский В.А. *Synlett*, 2018, **29**, 2035.

# ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИЯ 3-ЦИАНОМЕТИЛЕН-1,2,4-ТРИАЗИНОВ

Колтун Д.С.,<sup>a,б</sup> Иванов С.М.<sup>б</sup>

<sup>a</sup> ФГБОУ ВО Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,  
125047, Москва, Миусская площадь, 9,  
e-mail: deniscoltun@yandex.ru

<sup>б</sup> Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47

*трет*-Бутильные и адамантильные производные азотсодержащих гетероциклов проявляют необычные химические свойства и широкий спектр биологической активности<sup>1</sup>. В продолжение наших исследований<sup>2</sup>, изучены процессы циклизации в ряду 3-цианометилена-1,2,4-триазинов<sup>3</sup>.

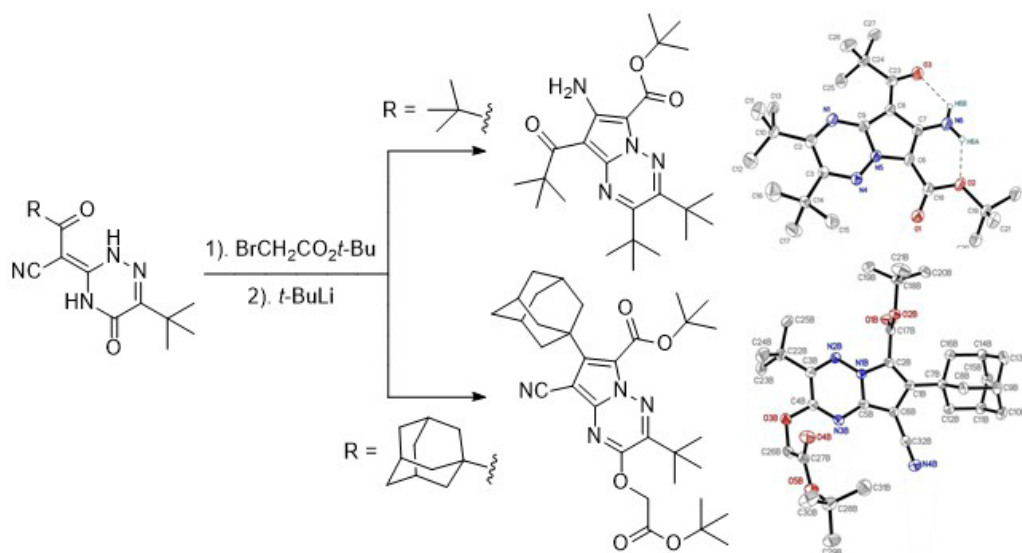


Рисунок 1. Синтез и монокристаллическая структура пирроло[1,2-*b*][1,2,4]триазинов

Нами установлено, что замена *трет*-бутильной группы на родственную ей адамантильную приводит к полному изменению направления реакции (рис. 1). Так, в случае R = *t*-Bu, наблюдалась *экзо-диг* циклизация Торпа по группе C≡N, в то время как для R = Ad-1 в аналогичных условиях протекала *экзо-триг* конденсация по карбонильной группе<sup>3</sup>. Наблюдаемая региоселективность образования пирроло[1,2-*b*][1,2,4]триазинов, по-видимому, связана со вторичными стерическими эффектами экранирования активного центра, изменениями в делокализации электронной плотности либо сольватной оболочке<sup>3</sup>.

## Литература

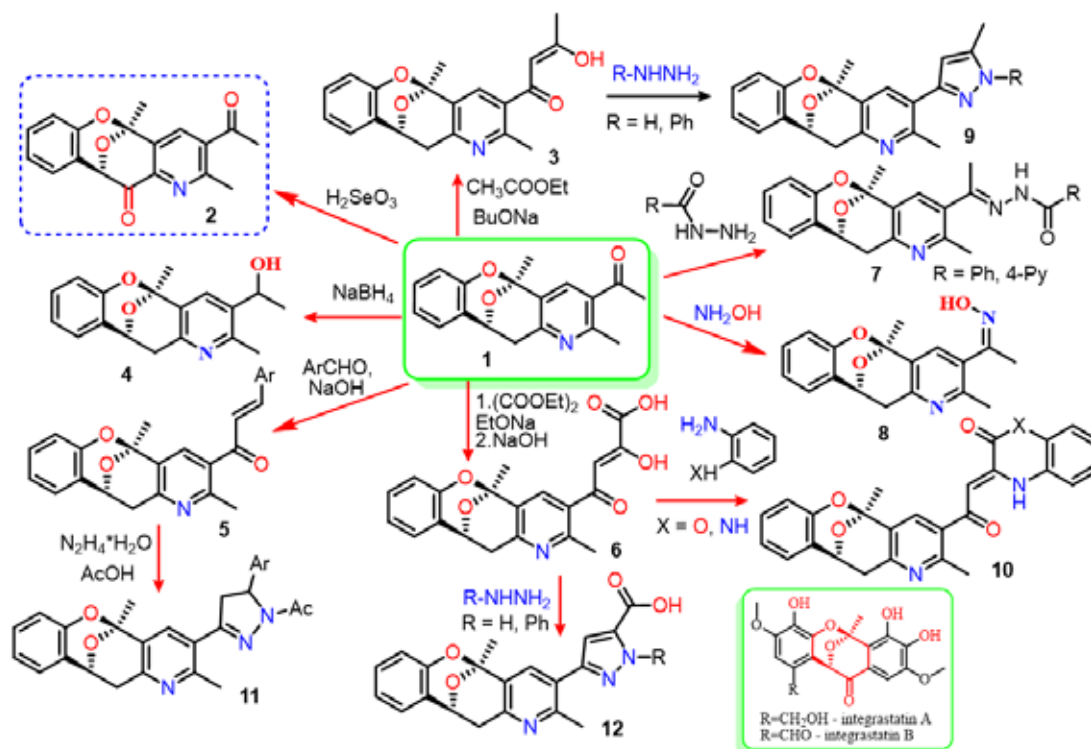
1. Шокова Э.А., Ковалев В.В. *Хим.-Фарм. Журн.*, 2016, **50**, 3.
2. Иванов С.М., Миронович Л.М., Даева Е.Д., Миняев М.Е. *Изв. АН Сер. Хим.* 2020, **69**, 1009.
3. Ivanov S.M. *J. Heterocycl. Chem.* 2021, published online, DOI: 10.1002/jhet.4255.

# СИНТЕЗ И МОДИФИКАЦИЯ НОВЫХ СТРУКТУРНЫХ АНАЛОГОВ ПРИРОДНЫХ ИНТЕГРАСТАТИНОВ С БАЗОВЫМ ЭПОКСИБЕНЗО[7,8]ОКСОЦИНОВЫМ КАРКАСОМ

**Кулаков И.В.,** Сталинская А.Л., Мартыненко Н.В.

*Институт химии, Тюменский государственный университет,  
ул. Перекопская, 15а, Тюмень, 625003, Россия,  
e-mail: i.v.kulakov@utmn.ru*

Недавно нами было показано [1], что в результате альдольной конденсации 3,5-диацетил-2,6-диметилпиридина с салициловым альдегидом в кислой среде образуются не бисазахаконы, а продукты внутримолекулярной циклизации – производные 5Н-5,11-эпоксибензо[7,8]оксоцино[4,3-7b]пиридина **1**, которые являются близкими структурными пиридиновыми аналогами природных интегратастинов А и В, являющихся мощными ингибиторами интегразы ВИЧ-1.



Далее с полученным оксоцином **1** провели химическую модификацию с получением сопряженных фармакофорных гетероциклов, которые могут представлять интерес в плане изучения их биологических свойств.

## Литература

1. Ivan V. Kulakov, Alena L. Stalinskaya, Semyon Y. Chikunov and Yuri V. Gatilov. *New J. Chem.*, 2021, **45**, 3559.

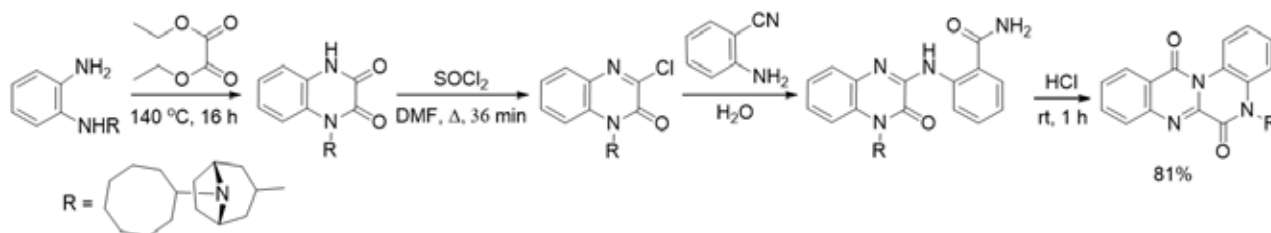
*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №19-03-00376А*

# СИНТЕЗ БИОЛОГИЧЕСКИ ЗНАЧИМЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ – ХИНОКСАЛИНО[2,1-*b*] ХИНАЗОЛИН-6,12(5*H*)-ДИОНОВ

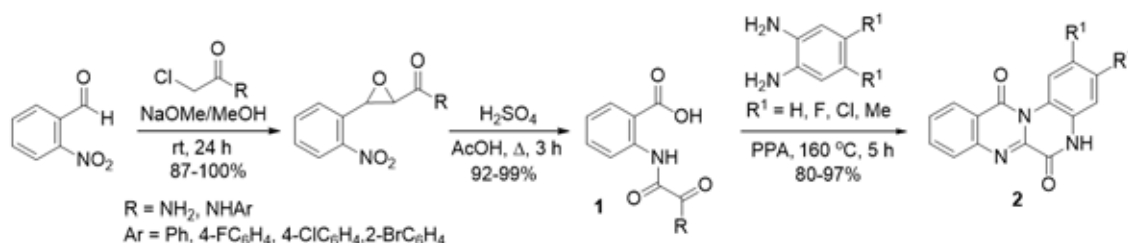
**Кушатов Т.А., Мамедова В.Л., Сякаев В.В., Воронина Ю.К., Мамедов В.А.**

*Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова –  
ОСП ФИЦ КазНЦ РАН, 420088 Казань, ул. Акад. Арбузова, 8  
e-mail: temur.kushatov@mail.ru*

Хиноксалино[2,1-*b*]хиназолин-6,12(5*H*)-дионы – тетрациклические ароматические системы с конденсированными хиноксалин-2- и хиназолин-4-оновыми гетероциклами в составе, полученные простыми методами из доступного сырья, являются редкими бигетероциклами, единственный аналог которых описан в патентной литературе (схема 1).<sup>1</sup>



Серия новых хиноксалино[2,1-*b*]хиназолин-6,12(5*H*)-дионов с хорошими выходами была получена взаимодействием *o*-фенилендиаминов с несимметрично замещёнными оксаламидами, получаемыми обнаруженной нами ранее новой кислотно катализируемой перегруппировкой 3-(*o*-нитрофенил)оксирано-2-карбоксамидов.2-3



## Литература

1. Goehring, Richard R. et all. *PCT Int. Appl.* 2009027820, 05.03.2009.
2. Mamedov V.A., Mamedova, V.L., Khikmatova G.Z., Mironova E.V., Krivolapov D.B., Bazanova O.B., Chachkov D.V., Katsyuba S.A., Rizvanov I.Kh., Latypov S.K. *RSC Adv.* 2016, **6**, 27885.
3. Qu Zh.-W., Zhu H., Katsyuba S.A., Mamedova V.L., Mamedov V.A., Grimme S. *ChemistryOpen* 2020, **9**, 743.

Работа поддержана грантом РФФ № 18-13-00315

Физико-химические исследования проведены в ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН

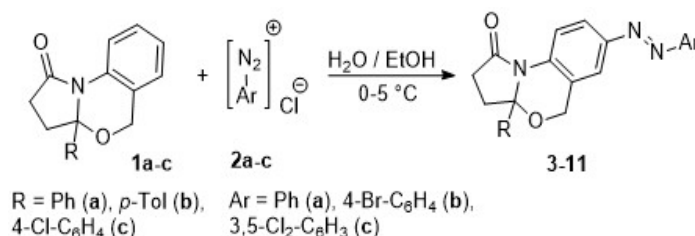
# СИНТЕЗ И ПРОГНОЗ ЛИПОФИЛЬНЫХ СВОЙСТВ 7-(АРИЛДИАЗЕНИЛ)-3А-АРИЛ-3,3А-ДИГИДРО-5Н-БЕНЗО[*d*] ПИРРОЛО[2,1-*b*][1,3]ОКСАЗИН-1(2Н)-ОНОВ

Линькова Е.И.,<sup>а</sup> Гринёв В.С.,<sup>а,б</sup> Егорова А.Ю.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет  
им. Н. Г. Чернышевского, 410012, Россия, г. Саратов,  
ул. Астраханская, 83, e-mail: alenaji2006@mail.ru

<sup>б</sup>Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН,  
410049, Россия, г. Саратов, просп. Энтузиастов, 13

Впервые изучено химическое поведение 3а-арилзамещённых 3,3а-дигидро-5Н-бензо[*d*]пирроло[2,1-*b*][1,3]оксазин-1(2Н)-онов **1а-с** в реакциях электрофильного замещения на примере азосочетания с хлоридами фенил-, 4-бромфенил- и 3,5-дихлорфенилдиазония. Реакции проводили в классических мягких условиях в водно-спиртовой среде при 0-5 °С.



Полученные ярко окрашенные вещества жёлто-оранжевого цвета представляют собой азокрасители, спектрально охарактеризованные (данными ИК, ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C спектроскопии, в том числе двухмерных экспериментов HSQC, HMBC, COSY, TOCSY) как 7-(арилдiazенил)-3а-арил-3,3а-дигидро-5Н-бензо[*d*]пирроло[2,1-*b*][1,3]оксазин-1(2Н)-оны **3-11**.

Для синтезированных азокрасителей **3-11** были *in silico* рассчитаны показатели липофильности (Log *P*)<sup>1</sup> – важный фактор при прохождении молекулы через клеточную мембрану. Выявлено, что наиболее липофильные вещества обнаружены среди галогензамещённых веществ (а именно с 4-бромфенильным заместителем в арилазофрагменте), в то время как вещества, содержащие фенилдиазенильный фрагмент, обладают самой низкой липофильностью, что может ограничивать их применение.

## Литература

1. <https://www.molinspiration.com>.
2. <https://www.organic-chemistry.org>.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-33-90157.



# ИЗУЧЕНИЕ СТРОЕНИЯ СПИРОПИРАНОВ, ПРОЯВЛЯЮЩИХ ФОТОХРОМНЫЕ СВОЙСТВА В ТВЕРДОЙ ФАЗЕ

Лукьянов Б.С.,<sup>а</sup> Пугачев А.Д.,<sup>а</sup> Ткачев В.В.,<sup>б</sup> Алдошин С.М.,<sup>б</sup>  
Islam Mohamed El said Mohamed El Sewify,<sup>а,в</sup>

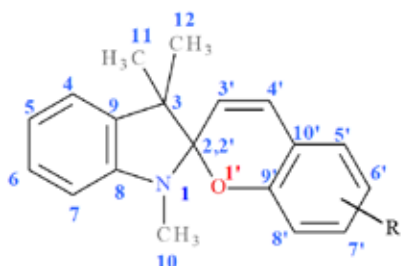
<sup>а</sup> *Институт физической и органической химии Южного федерального университета, 344090, Ростов-на-Дону, пр. Стачки 194/2  
e-mail: bslukyanov@sfnedu.ru*

<sup>б</sup> *Институт проблем химической физики РАН, Российская Федерация, 142432, Московская обл., г. Черноголовка, просп. акад. Семёнова 1*

<sup>в</sup> *Ain Shams University, Cairo, Egypt*

Исследуемые спиропираны, **1a,b** содержащие формильный заместитель в бензоядре 2*H*-хроменого фрагмента, проявляют фотохромные свойства не только в растворах, но и в твердой фазе.

Особенности строения изучены с помощью ИК и ЯМР спектроскопии, включая двумерные методики. Молекулярная структура спиропиранов установлена методом рентгеноструктурного анализа. На рисунке приводится совмещение полученных структур **1a,b** по индолиновому фрагменту в сравнении с незамещенным спиропираном **1c**. Можно предположить, что введение альдегидной группы в структуру индолинового спиропирана приводит к изменению положения 2*H*-хроменого фрагмента относительно индолинового. Влияние карбонильной группы в положении 6' 2*H*-хроменовой части более ярко выражено. Установлено, что формильная группа способствует удлинению связи C<sub>спиро</sub> – O, что облегчает процессы фотоизомеризации.



**1 a:** R = 6' CH<sub>3</sub>, 8' CHO;  
**b:** R = 6' CHO; 8' CH<sub>2</sub>-CH=CH<sub>2</sub>;  
**c:** R = H

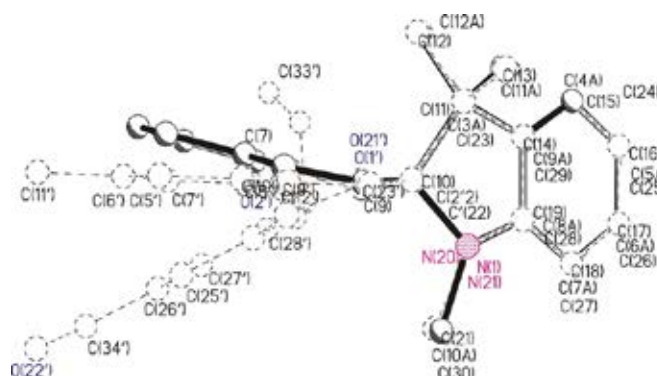


Рисунок 1.

Совмещение структур по индолиновому фрагменту

Межмолекулярные взаимодействия и пустоты в кристалле исследованы с применением программного пакета CrystalExplorer17. Показано, что кристаллы спиропиранов **1a,b** удовлетворяют условиям, необходимым для проявления фотохромизма и механохромизма в кристаллическом состоянии. Выявленные закономерности будут полезны при создании фотоактивных материалов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания в сфере научной деятельности № 0852-2020-00-19.



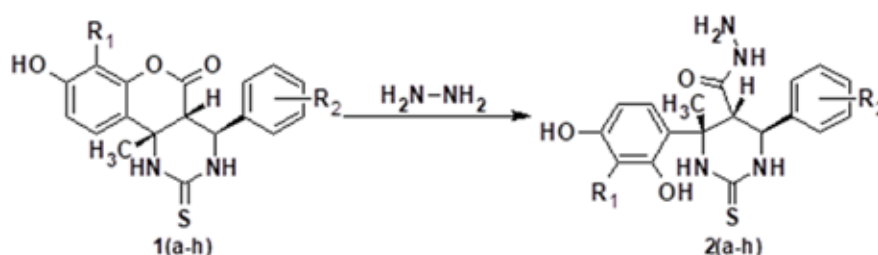
# СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ (4*R*\*,5*S*\*,6*R*\*)-2-ТИОГЕКСАГИДРОПИРИМИДИН-5-КАРБОГИДРАЗИДОВ

**Макарова Е.С., Филимонов С.И.**

*Ярославский государственный технический университет,  
 Российская Федерация, 150023 Ярославль, Московский просп., 88.  
 e-mail: l.makarowa2009@yandex.ru*

Замещенные гидразиды длительное время используются в фармакологии. Они проявляют антипролиферативную, противогрибковую и противотуберкулезную активности, а также антибактериальные свойства.

В качестве исходных соединений для синтеза были выбраны ранее полученные по разработанной методике<sup>1</sup> диастереомерно чистые (4*R*\*,4*aS*\*,10*bR*\*)-2-тио-1,2,3,4,4*a*,10*b*-гексагидро-5*H*-хромено[4,3-*d*]пиримидин-5-оны **1(a-h)**. Реакцию соединений **1(a-h)** с 10%-ным мольным избытком гидразингидрата проводили в кипящем изопропиловом спирте. Целевые 2-тиогексагидропиримидин-5-карбогидразиды **2(a-h)** были получены региоселективно с выходом 80-98% (схема 1)<sup>2</sup>.



**1,2:**  $R_1 = \text{H}, R_2 = \mathbf{a} - \text{H}, \mathbf{b} - 4\text{-Cl}, \mathbf{c} - 4\text{-OH}, \mathbf{d} - 4\text{-Me}, \mathbf{e} - 4\text{-MeO}, \mathbf{f} - 3\text{-NO}_2;$   
 $R_1 = \text{OH}, R_2 = \mathbf{g} - \text{H}; \mathbf{h} - 4\text{-Cl}$

Схема 1

Строение синтезированных карбогидразидов было доказано методами ИК- и ЯМР-спектроскопий, а также масс-спектрометрией. Особенностью спектров ЯМР <sup>1</sup>H этих соединений, как правило, является отсутствие сигналов ОН-групп из-за дейтеробмена протонов в растворе ДМСО-*d*<sub>6</sub>.

## Литература

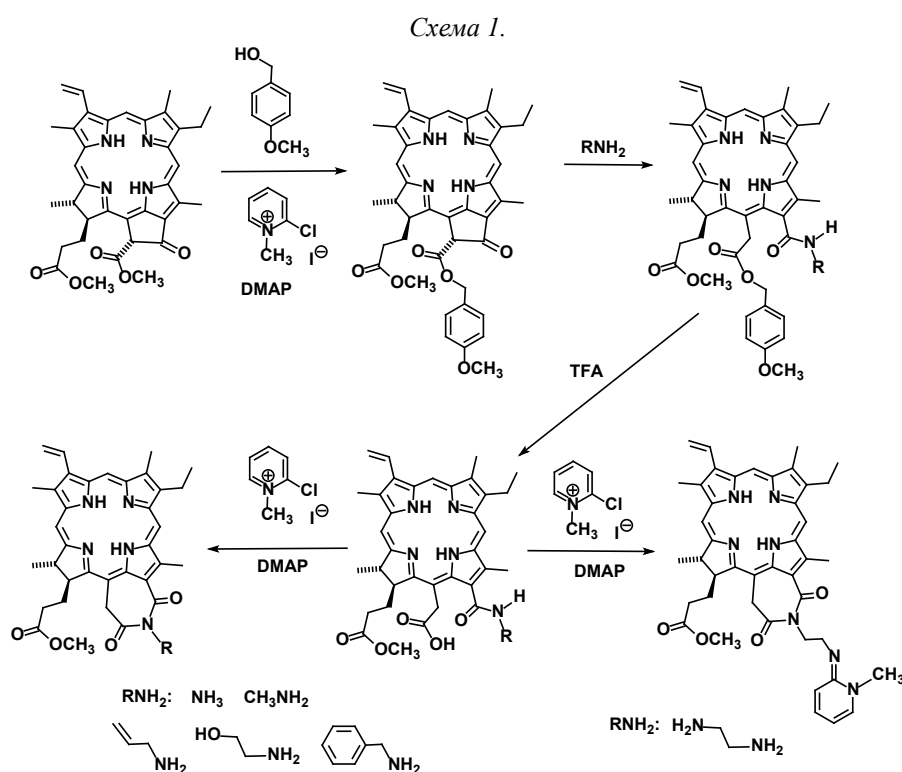
1. A Condensation of Biginelli Products with 1,3-Benzenediols: a Facile Access to Diastereomerically Pure Hexahydro-5*H*-chromeno[4,3-*d*]pyrimidin-5-ones / S.I. Filimonov, Zh.V. Chirkova, M.V. Kabanova [et al.] // ChemistrySelect. – 2019. – Vol. 4. – P. 9550-9555.
2. Макарова Е.С. Синтез и свойства замещенных 2-тиогексагидропиримидин-5-карбогидразидов / Е.С. Макарова, М.В. Кабанова, А.С. Данилова, С.И. Филимонов, Е.А. Смирнова, А.А. Шетнев // Известия АН. Серия хим. – 2021. – № 7. – С. 1377-1382.

# НОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ХЛОРОФИЛЛА А, СОДЕРЖАЩИЕ СЕМИЧЛЕННЫЙ ЭКЗОЦИКЛ

Мальшакова М.В., Белых Д.В.

ФИЦ Коми НЦ УрО РАН Институт химии,  
167000, Сыктывкар, ул. Первомайская, 48  
e-mail: malshakova-mv@yandex.ru

Производные хлорофилла *a* представляют интерес как потенциальные фотосенсибилизаторы медицинского назначения. Известно, что природа экзоцикла в макроциклических молекулах производных хлорофилла *a* влияет не только на важные с точки зрения фотодинамического действия спектральные и фотохимические характеристики, но и на биораспределение. Производные хлорофилла *a* с семичленным экзоциклом, сформированным имидной связью, ранее описаны не были. В настоящей работе синтезирован ряд циклоимидных производных хлорофилла *a*, семичленный экзоцикл которых сформирован при внутримолекулярной реакции активированной реагентом Мукайма карбоксильной группы в положении 15 хлоринового макроцикла с первичной или вторичной амидной группой в положении 13 (схема 1).



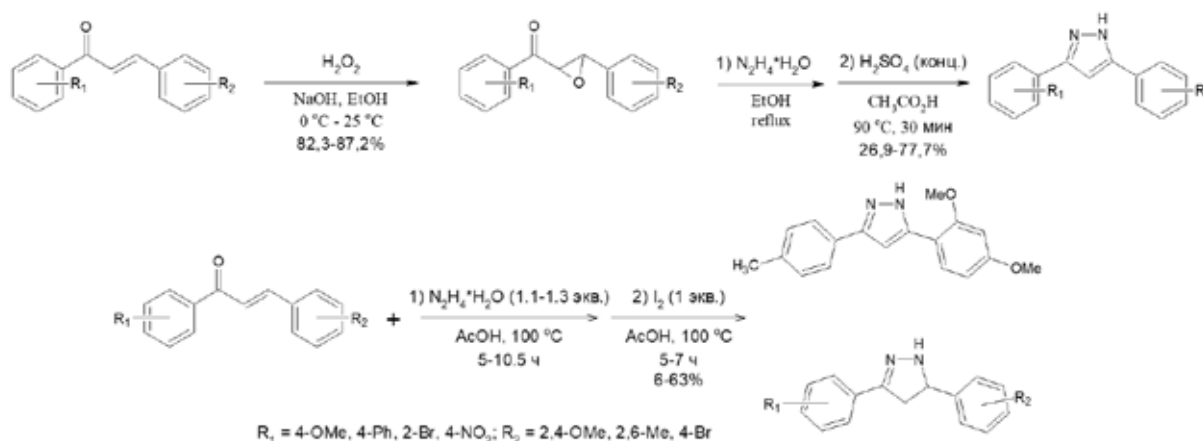
# СИНТЕЗ И ПРОТИВОМИКРОБНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ ПИРАЗОЛОВ НА ОСНОВЕ ХАЛКОНОВ

Мартинкевич Д.С.<sup>а</sup>, Тарасевич В.А.<sup>а</sup>, Ахромович Т.И.<sup>б</sup>

<sup>а</sup>Институт химии новых материалов НАН Беларуси,  
 220141, Республика Беларусь, г. Минск, ул. Ф. Скорины, 36  
 e-mail: den13martinkevich@gmail.com

<sup>б</sup>Белорусский государственный технологический университет,  
 220006, Республика Беларусь, г. Минск, ул. Свердлова, 13а

Целью исследования являлось получение новых гетероциклических соединений из замещённых халконов и исследование их антибактериальной и противогрибковой активности.



Была синтезирована серия гетероциклов пиразольного ряда на основе халконов с различными заместителями. Пиразолы получены путём взаимодействия эпоксидов халконов с гидратом гидразина и последующей дегидратацией<sup>1</sup>, а также реакцией халконов с гидратом гидразина в уксусной кислоте с дальнейшим окислением молекулярным йодом<sup>2</sup>. Выходы продуктов составили 6–78%.

Исследована противомикробная активность полученных гетероциклических соединений. Наибольшую чувствительность к данным веществам проявили микроорганизмы *C. albicans* ATCC 10231 и *Staphylococcus aureus* ATCC 6538.

## Литература

1. Bhat, B. A. Synthesis of 3,5-Diphenyl-1H-Pyrazoles / B. A. Bhat [et al.] // Synthetic Communications. – 2005. – Vol. 35, № 8. – P. 1135–1142.
2. Ponnala, S. Iodine-Mediated Synthesis of 2-Arylbenzoxazoles, 2-Arylbenzimidazoles, and 1,3,5-Trisubstituted Pyrazoles / S. Ponnala, D. P. Sahu // Synthetic Communications. – 2006. – Vol. 36, № 15. – P. 2189-2194.

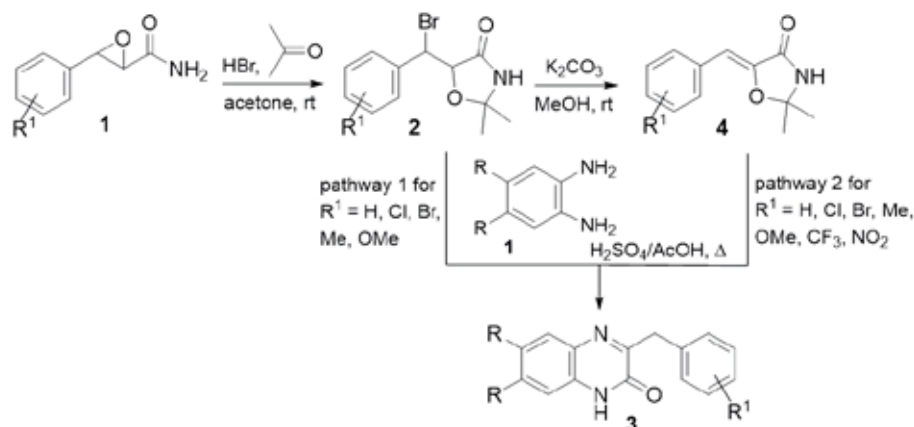
# ОБЩИЙ ПРОСТОЙ НОВЫЙ СПОСОБ СИНТЕЗА 3-БЕНЗИЛХИНОКСАЛИН-2(1*H*)-ОНОВ ИЗ АМИДОВ 3-АРИЛГЛИЦИДНОЙ КИСЛОТЫ ЧЕРЕЗ 5-( $\alpha$ -БРОМБЕНЗИЛ)- И 5-БЕНЗИЛИДЕН-2,2-ДИМЕТИЛ-1,3-ОКСАЗОЛИДИН-4-ОНЫ

**Махрус Е.М.,<sup>а,б</sup> Мамедова В.Л.,<sup>а</sup> Сякаев В.В.,<sup>а</sup> Воронина Ю.К.,<sup>а</sup>  
Хикматова Г.З.,<sup>а</sup> Коршин Д.Э.,<sup>а</sup> Мамедов В.А.<sup>а,б</sup>**

<sup>а</sup>Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова – ОСП ФИЦ КАЗНЦ РАН,  
420088 Казань, ул. Акад. Арбузова, 8

<sup>б</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
Российская Федерация, 420015 Казань, ул. Карла Маркса, 68  
e-mail: e.rous@hotmail.com

Хиноксалины – важный класс соединений, широко используемых фармакологической промышленностью, в связи с чем разработка новых эффективных способов их получения весьма актуальна.<sup>1,2</sup> Новый, простой в исполнении, общий способ получения 3-бензилхиноксалин-2-онов разработан нами исходя из амидов 3-арилглицидной кислоты (**1**), получаемых, в свою очередь, в условиях конденсации Дарзана из ароматических альдегидов и  $\alpha$ -хлорацетамида. Амиды арилглицидной кислоты (**1**) были превращены действием  $\text{HBr}$  в ацетоне в 5-( $\alpha$ -бромбензил)-2,2-диметил-1,3-оксазолидин-4-оны (**2**), которые реагировали с эквимолярным количеством *орто*-фенилендиамина в кипящей  $\text{AcOH}$  в присутствии  $\text{H}_2\text{SO}_4$  с образованием с хорошими выходами бензилхиноксалин-2(1*H*)-онов (**3**). Эта реакция не распространялась, однако, на оксазолидиноны (**2**) с акцепторными заместителями в арильном фрагменте, но была универсальной для 5-бензилиден-2,2-диметил-1,3-оксазолидин-4-онов (**4**), получаемых действием  $\text{K}_2\text{CO}_3$  в  $\text{MeOH}$  на **2**.



## Литература

1. Mamedov V.A. Quinoxalines. Springer 2016, 437 p.

Работа поддержана грантом РФФ № 18-13-00315

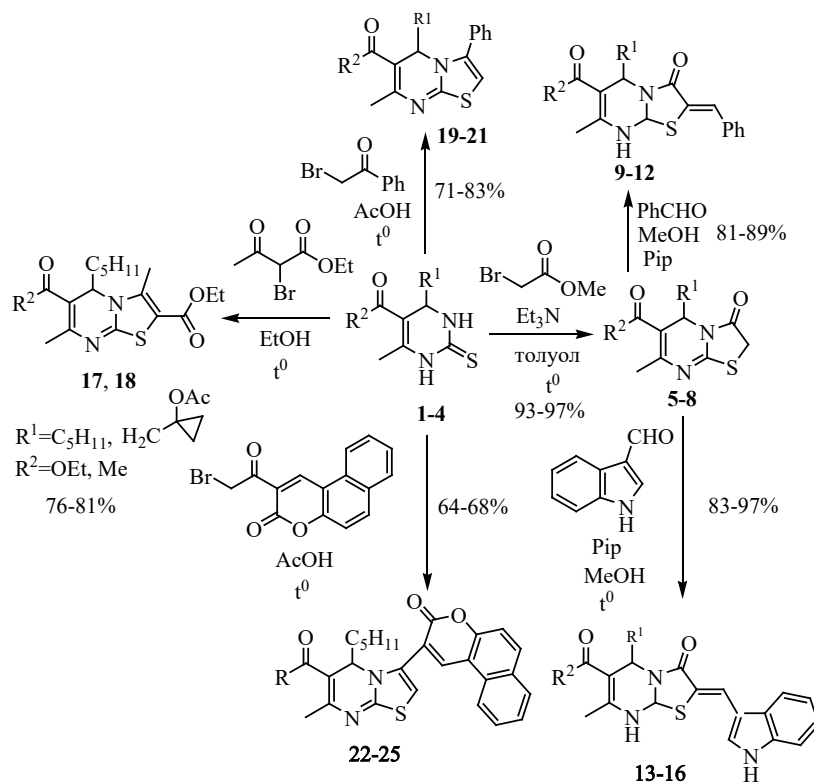
# СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2(1H)-ТИОНОВ

**Минеева И.В.,<sup>а</sup> Шкуматов В.М.<sup>а,б</sup>**

<sup>а</sup>*Химический факультет, Белорусский Государственный Университет,  
220030, Республика Беларусь, Минск, проспект Независимости 4  
e-mail: i.mineyeva@yandex.ru*

<sup>б</sup>*НИИ ФХП, Белорусский Государственный Университет,  
220006, Республика Беларусь, Минск, Ленинградская, 14*

Впервые осуществлен синтез новых производных 3,4-дигидропиримидин-2(1H)-тионов<sup>1</sup>, содержащих фрагменты алифатических альдегидов с циклопропанольными кольцами с высокими выходами. Синтезированы уникальные гетероциклические соединения содержащие циклопропанольный фрагмент, пиримидиновое ядро, фрагмент тиазола и бензокумарина<sup>2</sup>.



## Литература

1. Kaur R., Chaudhary S., Kumar K., Gupta M.K., Rawal R.K. *Eur. J. Med. Chem.* 2017, **132**, 108.
2. Viveka S., Dinesha Nagaraja G. K., Shama P., Basavarajaswamy G., Rao K. P., Yanjarappa S.M. *Med. Chem. Res.* 2018, **27**, 171.

# 2,2,5,5-ТЕТРАЭТИЛЗАМЕЩЕННЫЕ НИТРОКСИЛЬНЫЕ РАДИКАЛЫ ПИРРОЛИНОВОГО РЯДА: СИНТЕЗ И МОДИФИКАЦИИ

[Морозов Д.А.](#),<sup>а</sup> Добрынин С.А.,<sup>а</sup> Глазачев Ю.И.,<sup>б</sup> Кириллюк И.А.<sup>а</sup>

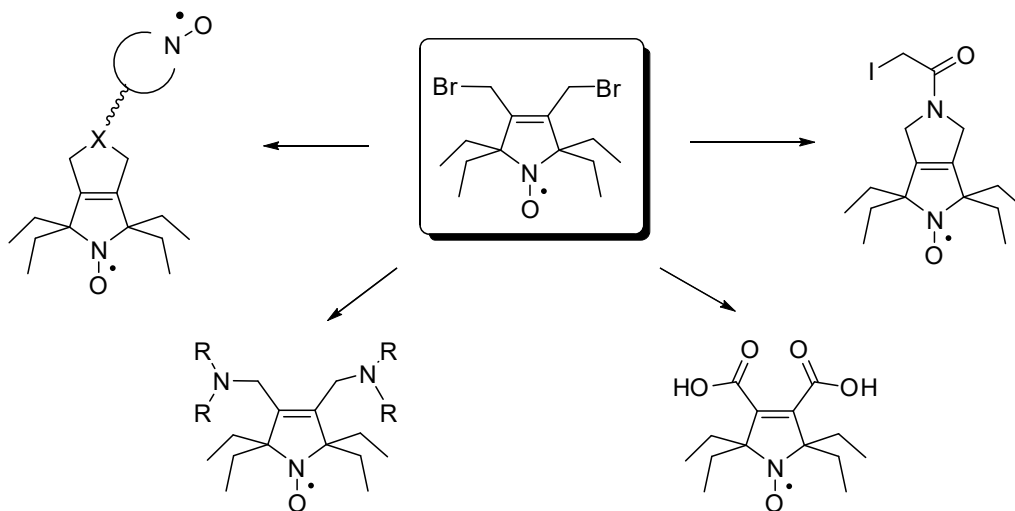
<sup>а</sup> Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН,  
630090, Новосибирск, проспект Лаврентьева, 9  
e-mail: [m\\_falcon@nioch.nsc.ru](mailto:m_falcon@nioch.nsc.ru)

<sup>б</sup> Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН,  
630090, Новосибирск, ул. Институтская, 3

Нитроксильные радикалы ряда 3-пирролина нашли широкое применение в качестве спиновых меток в биофизике, структурной биологии и медицинской химии.<sup>1</sup> Замена метильных групп в окружении нитроксильного фрагмента на этильные резко повышает устойчивость таких радикалов к восстановлению компонентами живых систем<sup>2</sup> и открывает возможности для исследований биохимических процессов в тканях живых организмов и внутри клеток.<sup>3</sup>

Нами разработан способ получения тетраэтилзамещенных нитроксильных радикалов пирролидинового ряда.<sup>4</sup> На основе этих радикалов были получены спиновые метки пирролидинового ряда и прототипы полностью органических контрастирующих агентов для МРТ.<sup>5</sup>

В настоящей работе показаны примеры синтеза разнообразных новых производных 2,2,5,5-тетраэтил-3-пирролин-1-оксида.



## Литература

1. K. Hideg, T. Kálai, C.P. Cár, J. Heterocyclic Chem., 42, 437 (2005).
2. Y. Wang, J. T. Paletta, K. Berg, E. Reinhart, S. Rajca, A. Rajca, Org. Lett. 2014, 16, 5298–5300
3. G. Karthikeyan, et al. Angew. Chem. Int. Ed. 10.1002/anie.201710184
4. S.A. Dobrynin et al., J. Org. Chem., 2018, V. 83, N 10, Pp 5392-5397
5. S.A. Dobrynin et al., Molecules, 2020, **25**, 1709.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-53-7600.

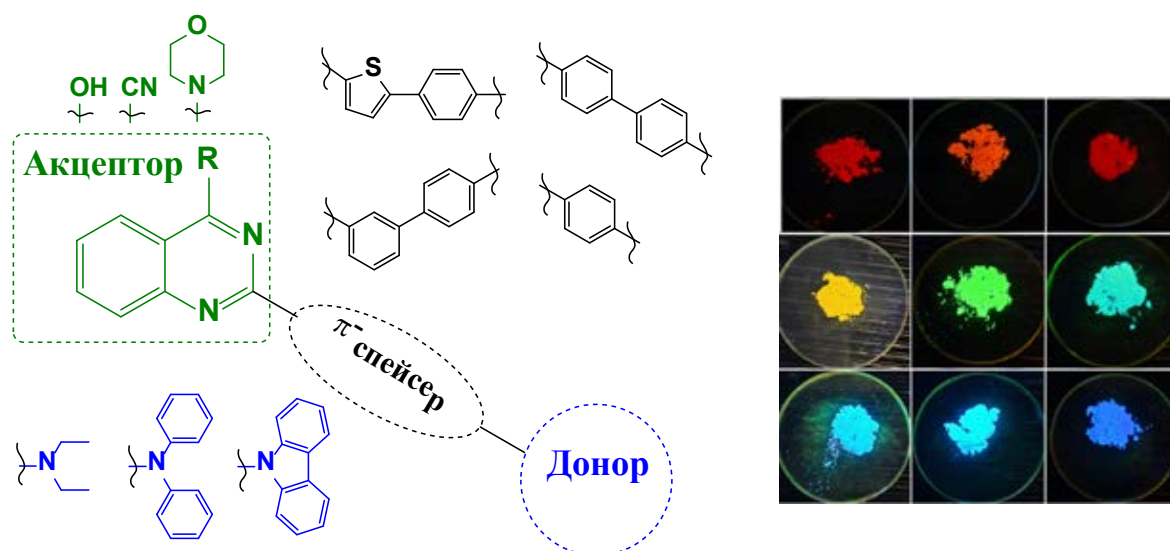
# ВЗАИМОСВЯЗЬ «СТРУКТУРА-ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА» В РЯДУ ХИНАЗОЛИН-СОДЕРЖАЩИХ ХРОМОФОРОВ

**Мошкина Т.Н.,<sup>a</sup> Пермякова Ю.В.,<sup>a</sup> Носова Э.В.<sup>a</sup> Липунова Г.Н.,<sup>b</sup> Чарушин В.Н.<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>Уральский федеральный университет им. первого Президента России  
Б.Н. Ельцина, 620002, Екатеринбург, ул. Мира, д. 19,  
e-mail: tan.moshckina@yandex.ru

<sup>b</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН  
620219, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 22

Молекулярные структуры, состоящие из электронодонорных и электроноакцепторных единиц, соединённых  $\pi$ -спейсером, представляют собой перспективный класс хромофоров для органической электроники.<sup>1-3</sup>



Серию новых хромофоров на основе хиनाзолина синтезировали в результате конденсации антраниламида с соответствующим альдегидом, функционализации по положению 4 гетероциклического остова и Pd-катализируемой реакции кросс-сочетания бром-производных с арилбороновых кислот/пинаколового эфира арилбороновой кислоты. Для полученных соединений изучено влияние природы электронодонорного, электроноакцепторного фрагментов, а также  $\pi$ -спейсера на фотофизические свойства. Все структуры продемонстрировали люминесцентные свойства как в растворе, так и в твёрдом состоянии. Показана хорошая чувствительность ряда 4-(морфолин-4-ил)хиназолинов к кислотности среды.<sup>4</sup>

#### Литература

1. Bureš F. RSC Adv., 2014, **4**, 58826.
2. Essam Z.M., Ozmen G.E., Setiawan D. et al, *Org. Biomol. Chem.*, 2021, **19**, 1835.
3. Rémond M., Zheng Z., Jeanneau E. et al, *J. Org. Chem.*, 2019, **84**, 9965.
4. Nosova E.V., Moshkina T.N., Lipunova G.N. et al, *Eur. J. Org. Chem.* 2016, **2016**, 2876.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 21-13-00304.

# КОМБИНИРОВАННЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ НА ОСНОВЕ АЛКАЛОИДА ЦИТИЗИНА

[Мукушева Г.К.](#)<sup>а</sup>, Жасымбекова А.Р.<sup>б</sup>, Кишкентаева А.С.<sup>б</sup>, Нурмаганбетов Ж.С.<sup>б</sup>,  
Минаева Е.В.<sup>б</sup>, Толеш А.М.<sup>а</sup>, Нуркенов О.А.<sup>с</sup>

<sup>а</sup>Карагандинский университет им. академика Е.А. Букетова,  
100028, Казахстан, Караганда, ул. Университетская, 28,  
e-mail: mukusheva1977@list.ru

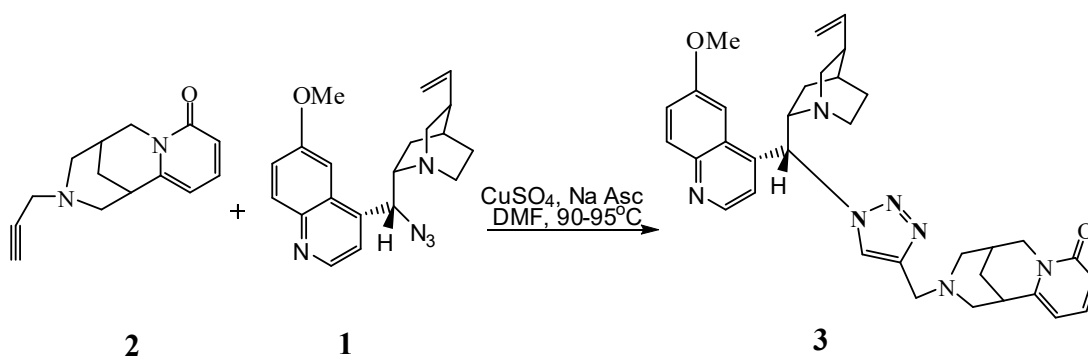
<sup>б</sup>Медицинский университет Караганды, Казахстан,  
100000, Караганда, ул. Гоголя, 40,

<sup>с</sup>Институт органического синтеза и углекислотной РК, Казахстан,  
100008, Караганда, ул. Алиханова, 1,

Актуальность проведения химических трансформаций растительных алкалоидов определяется необходимостью получения новых веществ, характеризующихся улучшенными физико-химическими свойствами, более выраженной биологической активностью, пониженной токсичностью, пролонгированностью действия по сравнению с исходными природными аналогами. В настоящее время растет интерес к синтезу комбинированных соединений на основе различных алкалоидов путем введения в их молекулу фрагментов лактонов, флавоноидов и других биологически активных соединений.

К числу алкалоидов, перспективных для синтетической трансформации, относится цитизин, обладающий высокой физиологической активностью.

Су-катализируемой реакции проведено 1,3-диполярное циклоприсоединение азида хирина **1** с пропаргил цитизином **2**, при этом получено комбинированное соединение **3** с количественным выходом.



Строение молекулы **3** подтверждено ЯМР  $^1\text{H}$ - и  $^{13}\text{C}$ -спектроскопией, а также данными двумерных спектров COSY ( $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ ) и HMQC ( $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ ).

Работа выполнена в рамках проекта №AP08855433 по грантовому финансированию Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан.



## КОВАЛЕНТНАЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ 2D ПОВЕРХНОСТИ ГРАФЕНА АЗИНАМИ

[Мусихина А.А.](#),<sup>1,2</sup> Чупахин О.Н.,<sup>1,2</sup> Утепова И.А.,<sup>1,2</sup> Зырянова Е.Ю.,<sup>1,2</sup> Чарушин В.Н.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уральский Федеральный Университет,  
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 28

<sup>2</sup>Институт органического синтеза Уральского отделения РАН,  
620990, Екатеринбург, С. Ковалевской, 22  
e-mail: a.a.musikhina@urfu.ru

Среди разнообразных химических подходов, направленных на модификацию 2D поверхности графена, распространенным приемом является ковалентная функционализация, в результате которой часть  $sp^2$ -гибридизированных С-атомов в базисной плоскости графена превращаются в  $sp^3$ -С-центры.

Прививка азидов к поверхности графена посредством взаимодействия С(графен)-С(азид) может привести к получению производных с большой площадью поверхности и большой адсорбционной способностью. Эти двумерные материалы могут применяться для химической экстракции отдельных редкоземельных элементов из сточных вод, а значит, быть перспективными с экологической точки зрения. Стратегия ковалентной функционализации графена гетероциклическими фрагментами представляет собой простой двустадийный *one-pot* метод (Схема 1).

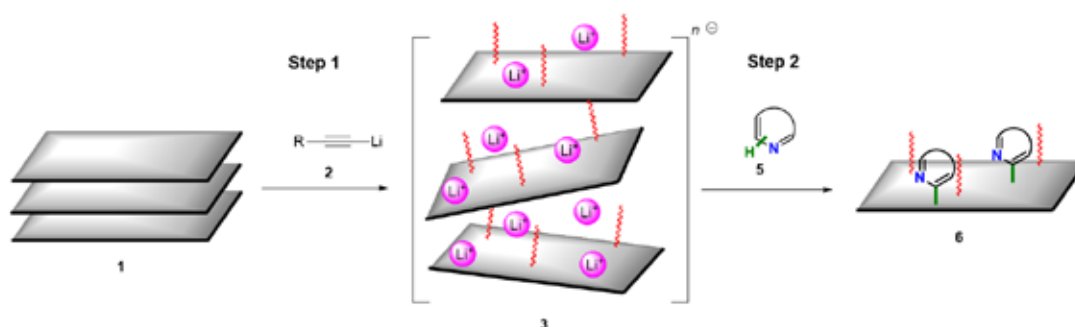


Схема 1. Ковалентная функционализация 2D поверхности графена.

В результате исследований были получены новые углеродные материалы, которые обладают неизоморфностью свойств и способны к комплексообразованию с ионами  $\text{Eu}^{3+}$ . Также было показано, что продукты способны адсорбировать на своей поверхности молекулы  $\text{CO}_2$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-43-660054 и №19-2908037) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Государственный контракт № FEUZ-2020-0058 (H687/42Б.223/20).

# САМОСОБИРАЮЩИЕСЯ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ И ПАВ

[Назарова А.А.](#), Якимова Л.С., Стойков И.И.

*Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казанский федеральный университет,  
420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлёвская, д. 18,  
e-mail: [anas7tasia@gmail.com](mailto:anas7tasia@gmail.com)*

Контролируемая самосборка полифункциональных структур в различные типы ассоциатов открывает широкие возможности для создания систем адресной доставки лекарственных средств и систем визуализации. Внедрение супрамолекулярной химии в биомедицину позволяет повысить биодоступность, пролонгировать действие применяемого препарата, а также предупредить его преждевременную деградацию.

Использование пиллар[5]аренов в качестве макроциклического компонента особенно привлекательно благодаря возможности модификации различными функциональными группами с обеих сторон макроциклической платформы. Пиллар[5]арены способны образовывать комплексы с различными биологически значимыми субстратами, задействуя при этом свою гидрофобную макроциклическую полость или заместители на обоих ободах макроцикла. Направленная функционализация пиллар[5]аренов позволяет управлять такими важными свойствами молекул как биодоступность и водорастворимость. Кооперативное действие полости и заместителей особенно характерно при комплексообразовании заряженных макроциклов и субстрата, например, молекул ПАВ. Варьирование стехиометрического состава смеси пиллар[5]арена и немакроциклического ПАВ, отрывает возможность получения как комплексов «гость-хозяин», так и полиэлектролитных совместных агрегатов макроцикл-ПАВ по аналогии с интерполиэлектролитными комплексами (ИПЭК) на основе противоположно заряженных полимеров.

В рамках данной работы были созданы новые самособирающиеся системы на основе противоположно заряженных пиллар[5]аренов и поверхностно-активных веществ для инкапсуляции красителя DAPI. Агрегационное поведение синтезированных макроциклов и поверхностно-активных веществ, было изучено рядом физических методов. Было показано, что варьируя мольное соотношение в системах пиллар[5]арен-ПАВ, можно получать различные типы наносистем: комплексы гость-хозяин при эквимолярном соотношении пиллар[5]арен-ПАВ и интерполиэлектролитные комплексы (ИПЭК), которые представляют собой самоорганизующиеся системы, образованные в водной среде двумя противоположно заряженными полиэлектролитами (макроциклом и мицеллами поверхностно-активного вещества).

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 18-73-10094.*

# СИНТЕЗ, РАЗДЕЛЕНИЕ И КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ АТРОПОИЗОМЕРНЫХ ГЕТЕРОБИАРИЛЬНЫХ P,N-ЛИГАНДОВ

**Немытов А.И.**,<sup>а</sup> Утепова И.А.,<sup>а,б</sup> Чупахин О.Н.,<sup>а,б</sup> Евгеньев В.А., Ишханян В.А.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Уральский федеральный университет,  
620002, Екатеринбург, Мира, 28,  
a.i.nemytov@urfu.ru

<sup>б</sup> Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского  
Уральского отделения Российской академии наук,  
620108, Екатеринбург, С. Ковалевской, 22

Создание новых хиральных лигандов, способных обеспечить высокий стереоконтроль в катализируемых металлами реакциях, имеет решающее значение в современном органическом синтезе. Производство биоактивных молекул в виде отдельных энантиомеров становится необходимым этапом в фармацевтической промышленности. В этой связи асимметричный катализ представляет собой одну из наиболее эффективных синтетических стратегий для доступа к оптически активным соединениям.

На основе 1,3-диазинов и 2-нафтола нами были получены ряд аксиально хиральных P,N-лигандов **3а-д**. Разделение гетеробиирилов на атропоизомеры было осуществлено в присутствии палладиевого димера **4**.

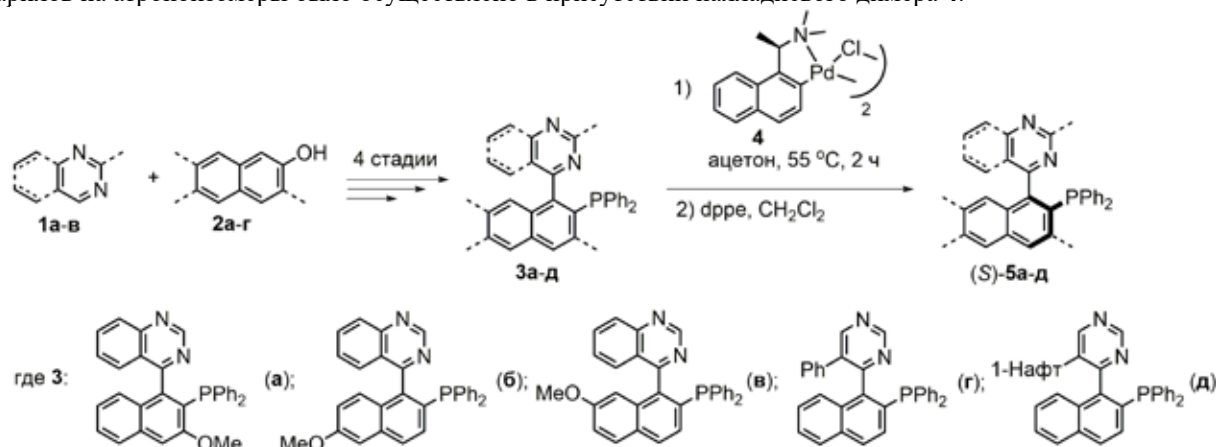


Рисунок 1. Общая схема получения гетеробиирильных атропоизомерных P,N-лигандов

Каталитическая активность полученных лигандов была исследована в Pd-катализируемом аллильном алкилировании. Установлено, что при взаимодействии 1,3-дифенил-2-пропенилацетата и диэтилмалоната в присутствии димера аллилпалладий хлорида и хирального (*S*)-**5б** образуется диэтил[(1*R*,2*E*)-1,3-дифенилпропен-2-ил]малонат с количественным выходом и 81% энантиомерным избытком.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Свердловской области, проект 20-43-660054

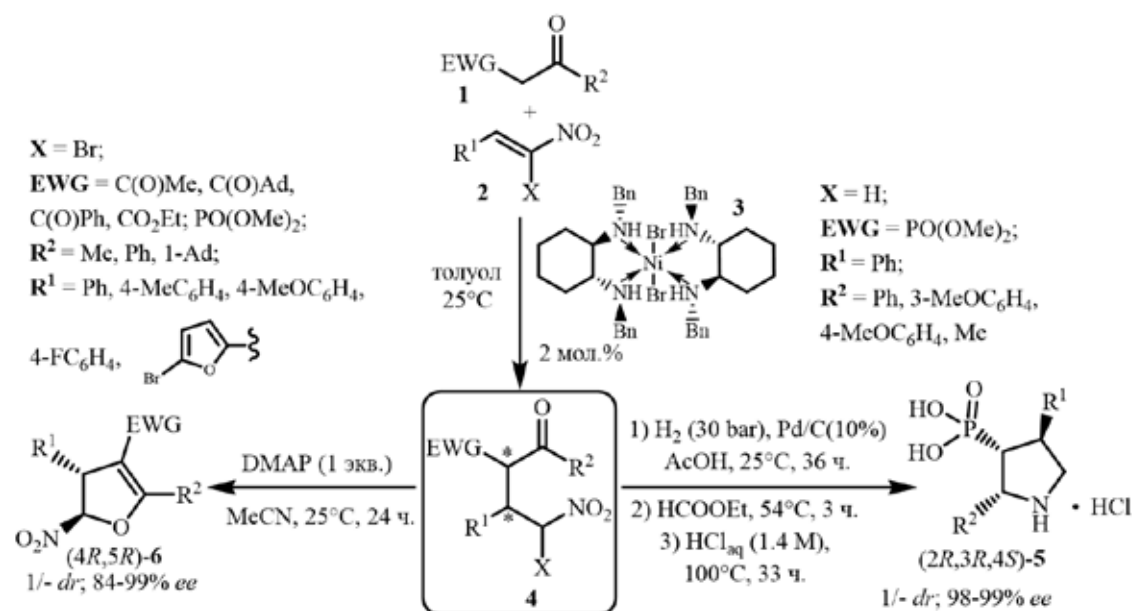
# СИНТЕЗ НЕРАЦЕМИЧЕСКИХ ПЯТИЧЛЕННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НИТРОПРОИЗВОДНЫХ

**Никеров Д.С., Резников А.Н., Ашаткина М.А., Климошкин Ю.Н.**

Самарский государственный технический университет  
443100, Россия, Самара ул. Молодогвардейская, 244.  
d.nikerov@mail.ru

Разработаны высокоэффективные стратегии энантио- и диастереоселективного синтеза производных пирролидин-3-ил-фосфоновых кислот (**5**) и 4,5-дигидрофуранов (**6**) на основе нерацемических продуктов (**4**), полученных путем асимметрической реакции Михаэля, протекающей в присутствии комплекса Ni(II) (**3**).

Представленные пятичленные гетероциклы получены с хорошими выходами и с отличной диастерео- и энантиоселективностью (до 99% ee). Абсолютная конфигурация гетероциклов определена методом PCA<sup>1,2</sup>.



## Литература

1. Reznikov A.N., Nikerov D.S., Sibiryakova A.E., Rybakov V.B., Golovin E.V., Klimochkin Y.N. *Beilstein J. Org. Chem.*, 2020, **16**, 2073-2079.
2. Nikerov D.S., Ashatkina M.A., Shiryaev V.A., Tkachenko I.M., Rybakov V.B., Reznikov A.N., Klimochkin Y. N. *Tetrahedron*, 2021, **84**, 132029.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 21-73-20096)

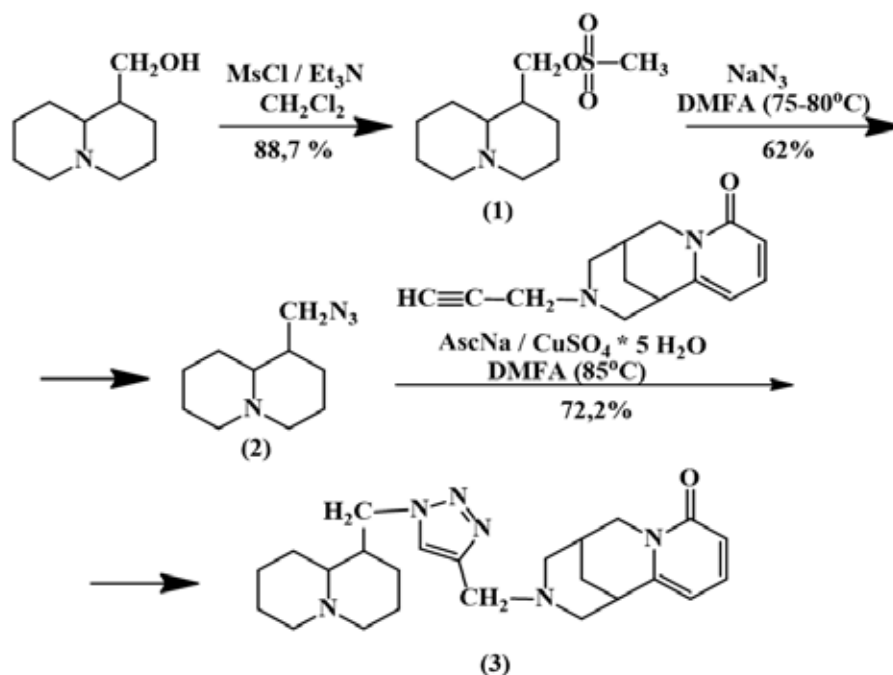
# СИНТЕЗ 1,2,3-ТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩЕГОСЯ ПРОИЗВОДНОГО АЛКАЛОИДОВ ЛУПИНИНА И ЦИТИЗИНА

**Нуркенов О.А.,<sup>a</sup> Кишкентаева А.С.,<sup>b</sup> Нурмаганбетов Ж.С.,<sup>a,b</sup>  
Фазылов С.Д.,<sup>a</sup> Животова Т.С.,<sup>a</sup> Мукушева Г.К.<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Институт органического синтеза и углехимии Республики Казахстан,  
100008, Караганда, ул. Алиханова, 1,  
e-mail: nurkenov\_oral@mail.ru*

<sup>b</sup> *Медицинский университет Караганды, Казахстан,  
100000, Караганда, ул. Гоголя, 40*

Представлены результаты изучения синтеза 3-((1-((октагидро-1н-хинолизин-1-ил)метил)-1Н-1,2,3-триазол-4-ил)метил)-3,4,5,6-тетрагидро-1-Н-1,5-метанопиридо[1,2-а][1,5]диазозин-8(2Н)-она реакцией конденсации азида лупинина с N-пропаргилцитизинном в присутствии  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  и аскорбата натрия.



Соединения (1-3) очищали колоночной хроматографией на окиси алюминия. Строение соединений (1-3) были подтверждены методами ЯМР<sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C спектроскопии и масс-спектрометрии. N-Пропаргилцитизин синтезирован по известной методике<sup>1</sup>.

## Литература

1. Нуркенов О.А., Байкенова Г.Г., Турдыбеков Д.М., Ибраев М.К., Газалиев А.М., Турдыбеков К.М. *Журн. общ. химии*, 2006, **76**, 132.

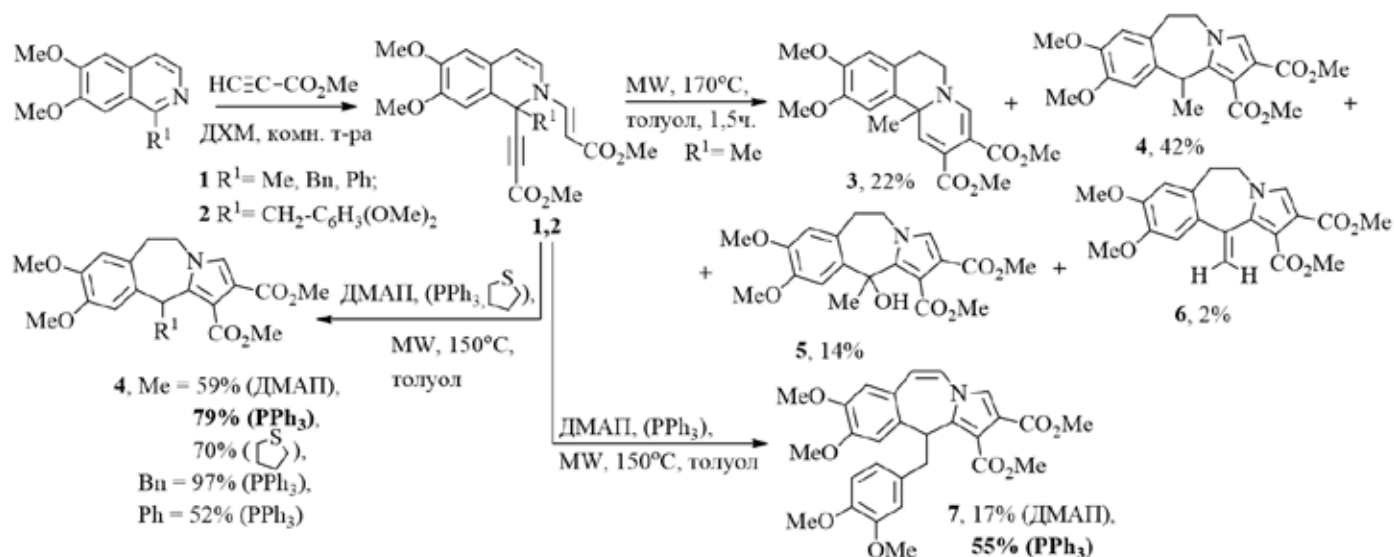
*Работа выполнена при финансовой поддержке КН МОН РК, проект № AP08855567.*

# НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА ПИРРОЛО[2,1-В][3]БЕНЗАЗЕПИНОВ С УЧАСТИЕМ [3,3]-СИГМАТРОПНОЙ ПЕРЕГРУППИРОВКИ

Обыденник А.Ю., Титов А.А., Варламов А.В.

Российский университет дружбы народов (RUDN University),  
117198, Москва, Миклухо-Маклая, 6  
e-mail: arina.abydennik@gmail.com

[3,3]-Сигматропные перегруппировки являются удобным методом построения различных гетероциклических систем. В данной работе мы сообщаем о новом подходе к синтезу пирроло[2,1-*b*][3]бензазепинов, основанном на [3,3]-трансформации замещенных изохинолинов. Исходные соединения **1** и **2**, содержащие метоксикарбонилэтинильную и метоксикарбонилвинильную группы в положении 1 и 2, были получены взаимодействием 1-*R*<sup>1</sup>-6,7-диметокси-3,4-дигидроизохинолинов и папаверина с избытком метилпропиолята.



При термическом инициировании [3,3]-сигматропной перегруппировки из изохинолина **1** ( $\text{R}^1 = \text{Me}$ ) образуются четыре продукта **3-6**, данная реакция синтетического значения не имеет. При действии на соединение **1** нуклеофилов ( $\text{DMAP}$ ,  $\text{PPh}_3$ , тетрагидротиофена), которые могут взаимодействовать с тройной связью этинильного фрагмента, образуются пирролобензазепины **4** с выходами 52-97%, соответственно. Папаверин **2**, производное изохинолина, при действии  $\text{PPh}_3$  образует с хорошим выходом пирролобензазепин **7**.

## Литература

1. Кобзев М.С., Титов А.А., Варламов А.В. *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2021, 7, 1213-1259.

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства РУДН.

# НЕКОНДЕНСИРОВАННЫЕ 1,2,4-ТРИАЗОЛЫ: СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

**Овакимян А.А.,<sup>a</sup> Сиракян С.Н.,<sup>a</sup> Акопян Э.К.,<sup>a</sup> Geronikaki A.<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Институт тонкой органической химии Научно-технологического центра органической и фармацевтической химии Национальной Академии Наук Республики Армения,  
пр. Азатутян, 26, Ереван 0014, Армения  
e-mail: aaa.h.87@mail.ru

<sup>b</sup>Aristotle University of Thessaloniki, School of Pharmacy, Thessaloniki 54124, Greece

Синтез 1,2,4-триазолов и их производных является актуальной задачей современной медицинской химии в связи с различной фармакологической активностью этих соединений. Отдельные представители этого класса соединений обладают противоопухолевым, противовирусным, противогрибковым, противомаларийным и антибактериальным действием<sup>1-3</sup>.

В настоящей работе описывается метод синтеза новых не конденсированных производных 1,2,4-триазолов по нижеприведенной схеме. Так, при взаимодействии соединений **1**<sup>4</sup> с гидразингидратом получены соответствующие ацетогидразиды **2**. Реакция последних с фенилтиоцианатом привела к образованию соединений **3**, которые под действием гидроксида натрия циклизуются в целевые 5-меркапто-4-фенил-1,2,4-триазолы **4**. Далее, 1,2,4-триазолы **4** были алкилированы различными галогенидами с получением S-алкилированных производных 1,2,4-триазолов **5** (Схема 1).

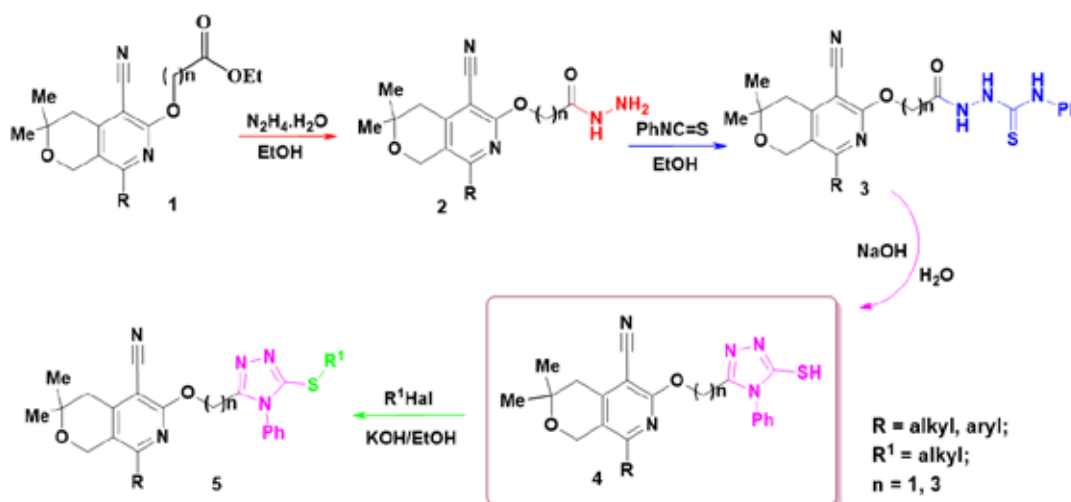


Схема 1. Синтез и превращения 1,2,4-триазолов 4.

## Литература

1. Al-Masoudi I.A., Al-Soud Y.A., Al-Salihi N.J., Al-Masoudi N.A. *Chem. Heterocycl. Compd.*, 2006, **42**, 1377.
2. Kaur R., Dwivedi A.R., Kumar B., Kumar V. *Anti-Cancer Agents Med. Chem.*, 2016, **16**, 465.
3. Boechat N., Pinheiro L., Santos-Filho O.A., Silva I.C. *Molecules*, 2011, **16**, 8083.
4. Sirakanyan S.N., Spinelli D., Geronikaki A., et al. *Molecules*, 2021, **26**, 3320.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета по науке РА проект 20TTWS-1D009.



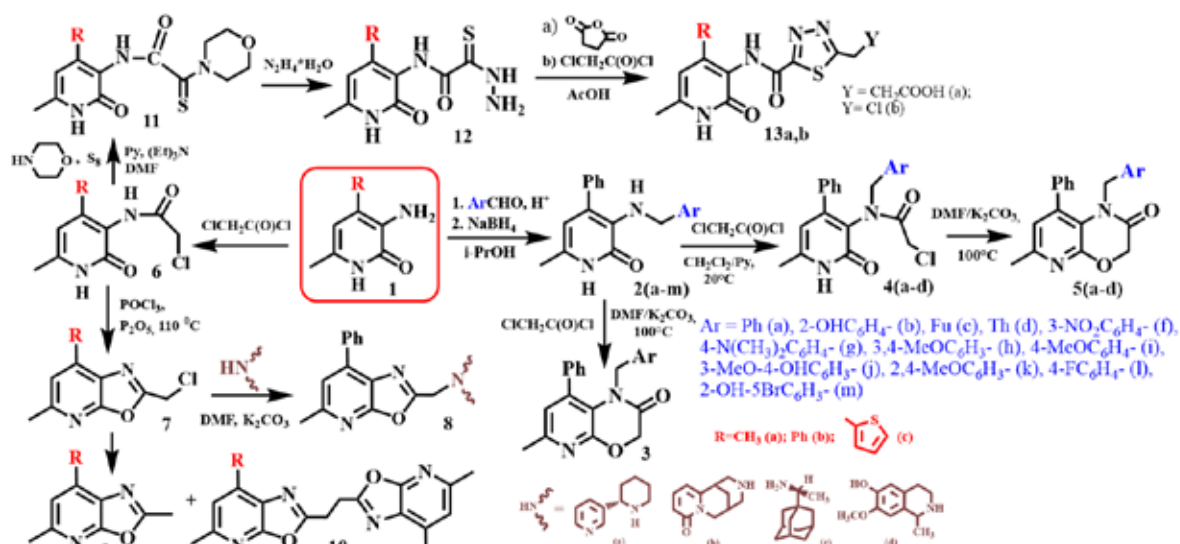
# СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ 3-АМИНОПИРИДИН-2(1H)-ОНОВ

Паламарчук И.В.<sup>а</sup>, Кулаков И.В.<sup>а</sup>, Фисюк А.С.<sup>б</sup>

<sup>а</sup>Институт химии, Тюменский государственный университет,  
625003, Тюмень, Переконская 15а, e-mail: i.v.palamarchuk@utmn.ru

<sup>б</sup>Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
644077 Омск, пр. Мира, 55а.

Производные 3-аминопиридин-2(1H)-онов представляют интерес в качестве потенциальных биологически активных соединений. Нами проведена модификация 3-аминопиридин-2(1H)-онов с введением некоторых фармакофоров по двум нуклеофильным центрам (NH<sub>2</sub> и OH) с образованием различных конденсированных и сопряженных производных, многие из которых проявили высокую биологическую активность.



Среди синтезированных функциональных производных выявлены вещества с нейротропной (2a-m)<sup>1</sup>, антирадикальной (10)<sup>2</sup>, противодиабетической (13a), противовоспалительной (8a-d, 5a-d) и анальгетической (2a, d, f) активностью.

## Литература

1. Palamarchuk I.V., Shulgau Z.T., Kharitonova M.A., Kulakov I.V. *Chemical papers*, 2021. DOI: 10.1007/s11696-021-01696-7.
2. Kulakov I.V., Palamarchuk I.V., Shulgau Z.T., Seilkhanov T.M., Gatilov Y.V., Fisyuk A.S. *Journal of Molecular Structure*, 2018, **1166**, 262.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-01143\_мол а.

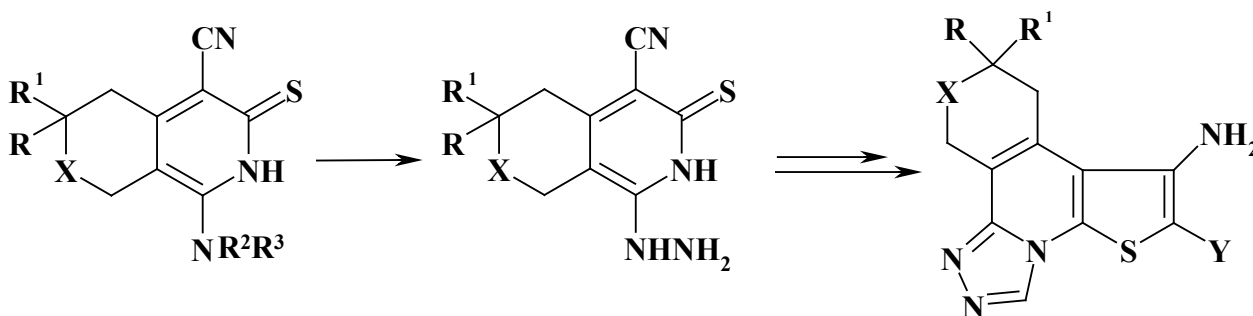


# СИНТЕЗ ТЕТРАЦИКЛИЧЕСКИХ ТИЕНОТРИАЗОЛОПИРИДИНОВ НА ОСНОВЕ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ПИРИДИНОВ

Пароникян Е.Г., Дашян Ш.Ш., Арутюнян А.С.

Научно-технологический центр органической и фармацевтической химии НАН Республики  
Армении, 0014, Ереван, пр. Азатутян, 26  
e-mail: [ervand.paronikyan@mail.ru](mailto:ervand.paronikyan@mail.ru)

Производные триазоло[4,3-*a*]пиридинов и тиено[2,3-*b*]пиридинов обладают широким спектром биологической активности [1-4]. Это послужило основанием для разработки методов синтеза конденсированных тиено[3,2-*e*][1,2,4]триазоло[4,3-*a*]пиридинов. Синтез включает нуклеофильное замещение гидразингидратом пиридинтионов содержащих в первом положении вторичную аминную группу. Наличие в конденсированных пиридинах гидразинной и тионной групп позволило синтезировать тиено[3,2-*e*][1,2,4]триазоло[4,3-*a*]пиридины с хорошими выходами.



## Литература

1. Elgemeie G., Altalbawy F., Alfaidi M., Azab R., Hassan A. *Drug Des., Dev. Ther.*, 2017, **2017(11)**, 3389.
2. Paronikyan E. G., Petrou A., Fesatidou M., Geronikaki A., Dashyan Sh. Sh., Mamyan S. S., Paronikyan R. G., Nazaryan I. M., Hakopyan H. H. *Med. Chem. Commun.*, 2019, **10**, 1399
3. Gao L. J., Kovackova S., Sala M. *J. Med. Chem.*, 2014, **57**, 7624.
4. Naguib B. H., El-Nassan H. B. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.*, 2016, **31**, 1718.

# ПОЛУЧЕНИЕ 1,4-ДИГИДРОПИРИДИНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГАММА-АМИНОМАСЛЯНОЙ КИСЛОТЫ С ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ПРОТИВОСУДОРОЖНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Поливанова А.Г.<sup>а</sup>, Семёнкин А.С.<sup>а</sup>, Аббасова К.Р.<sup>б</sup>, Осипова Н.С.<sup>а</sup>,  
Завадовский Р.А.<sup>а</sup>, Шипуло Е.В.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,  
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9,  
zagchem@mail.ru

<sup>б</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
Россия, Москва, 119991, ул. Колмогорова, 1.

Многочисленные заболевания ЦНС имеют общую проблему – низкую эффективность медикаментозной терапии вследствие наличия специализированных биологических барьеров (например, ГЭБ). В следствие этого модификация известных лекарственных препаратов (ЛП) с целью увеличения их биодоступности является актуальной задачей.

В данной работе реализуется подход, согласно которому в ЛП (аналог ГАМК) вводится два ключевых фрагмента: сложнoэфирная группа с липофильным радикалом, а также 1,4дигидропиридиновый цикл<sup>1</sup>. Эта модификация позволяет увеличить эффективность проникновения через ГЭБ посредством пассивного транспорта, а также (за счёт способности пиридинового фрагмента к биоокислению до заряженного пиридиния в клетках-мишенях) молекула получает способность удерживаться там более длительное время и проявлять пролонгированное действие.

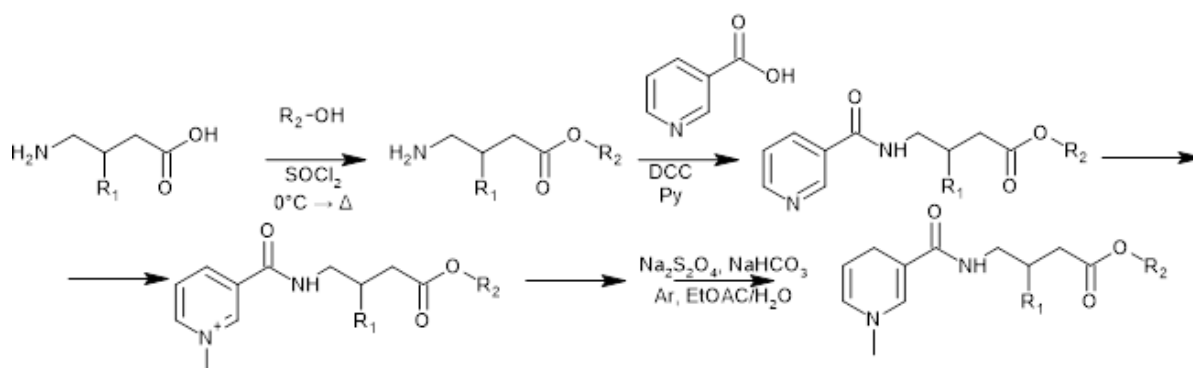


Таблица №1

Соединение	R	LogP	Суммарный выход, %
<b>4a</b>	CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	2,83±0,44	25
<b>4b</b>	н-C <sub>6</sub> H <sub>11</sub>	3,14±0,43	33
<b>4c</b>	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	2,14±0,43	25

## Литература

1. Pop E., Bodor N. *Epilepsy research*, 1992, **13**, 1-16.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №20-015-00220 А.

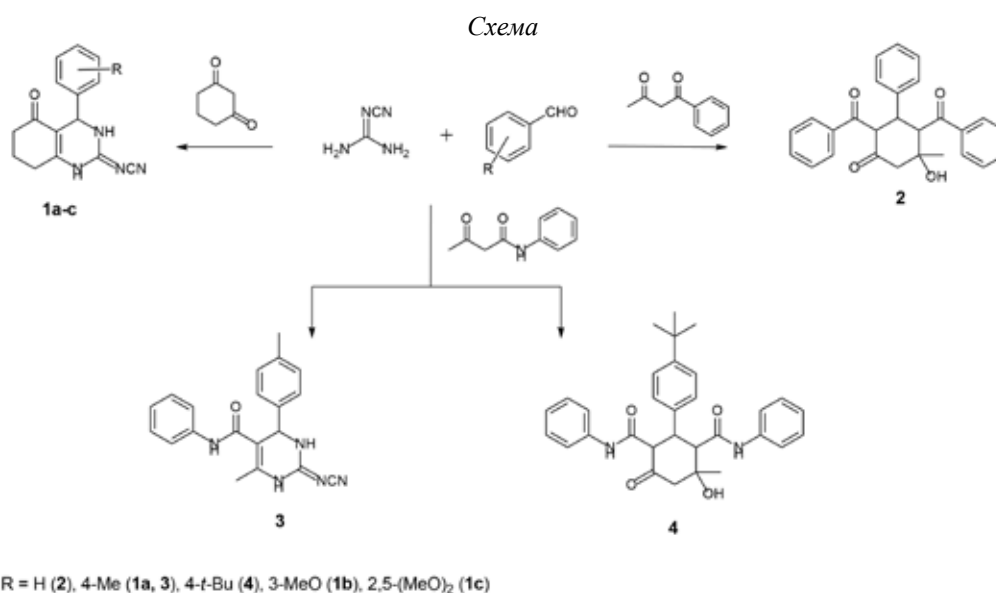
# РЕАКЦИЯ ЦИАНОГУАНИДИНА С АРОМАТИЧЕСКИМИ АЛЬДЕГИДАМИ И РАЗЛИЧНЫМИ СН-КИСЛОТАМИ

[Прудникова А.Н.](#), Гейн В.Л.

ФГБОУ ВО «Пермская государственная фармацевтическая академия» Минздрава  
 России, 614990, г. Пермь, Полевая 2  
 e-mail: prudnik\_an@mail.ru

Производные 2-цианоиминопиримидина – перспективные соединения для поиска новых лекарственных средств<sup>1</sup>. Осуществить их синтез с помощью известной реакции Биджинелли зачастую сложно ввиду низкой нуклеофильности цианогванидина<sup>2</sup>. Однако при проведении указанной реакции в отсутствие растворителя при температуре 120–150 °С можно получить с хорошими выходами N,6-диарил-4-метил-2-цианоимино-1,2,3,6-тетрагидропиримидин-5-карбоксамиды<sup>3</sup>.

С целью продолжения этого исследования мы расширили ряд используемых СН-кислот (схема). Структура полученных соединений подтверждена данными спектроскопии ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C и ИК.



В результате работы было установлено, что природа СН-кислоты и природа заместителя в ароматическом альдегиде оказывают существенное влияние на направление реакции в данных условиях.

## Литература

- Шкурко О.П., Толстикова Т.Г., Седова В.Ф. *Успехи химии*, 2016, **85**, 1056.
- Hulme R., et al., *Tetrahedron*, 2008, **64**, 3372.
- Гейн В.Л., Замараева Т.М., Дмитриев М.В., *Журнал общей химии*, 2017, **87**, 336.

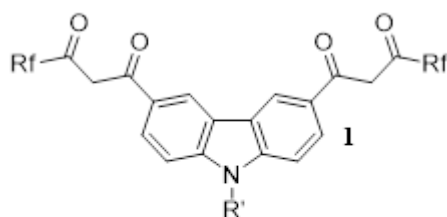
# НОВЫЕ КАРБАЗОЛЬНЫЕ ЛИГАНДЫ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ ИММУНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА

[Пугачёв Д.Е.](#),<sup>а,б</sup> [Парамонов Д.В.](#),<sup>а,б</sup> [Васильев Н.В.](#)<sup>а,б</sup>

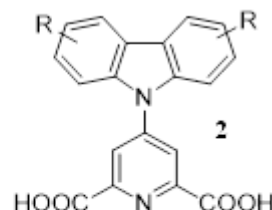
<sup>а</sup> *Московский государственный областной университет,  
141014, Московская обл., г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24,  
e-mail [pugachovdmitry@gmail.com](mailto:pugachovdmitry@gmail.com)*

<sup>б</sup> *ФГУП государственный научно-исследовательский институт биологического приборостроения  
ФМБА России, 125424, г. Москва, Волоколамское шоссе, д.75, к.1*

Соединения на основе карбазола, которые способны образовывать устойчивые комплексы с РЗЭ, являются насущной темой исследований, связанных с разработкой биочипов для определения заболеваний иммунофлуоресцентным методом. Молекулярное конструирование флуоресцентных зондов с разными полосами эмиссии света представляется актуальной задачей, в результате выполнения которой предполагается реализация мультиплексных типов анализа. Фрагмент карбазола предоставляет широкие синтетические возможности по созданию таких реагентов. На данный момент синтезированы фторсодержащие тетракетоны **1**, полученные различными модификациями реакции по Кляйзену<sup>1-3</sup>, которые являются устойчивыми флуоресцирующими комплексонами для ионов  $\text{Eu}^{3+}$ .



Rf:  $\text{CF}_3$ ,  $\text{C}_3\text{F}_7$ ,  $\text{C}_4\text{F}_9$   
R': H, Alk, Ar, Alk-COOH



R: H, Alk, Ar

Для дискретного анализа биоспецифических взаимодействий при выявлении биопатагенов необходимо наличие, по крайней мере, двух флуоресцентных маркеров и, в связи с этим, нами были разработаны методы синтеза карбазолсодержащих пиридиндикарбоновых кислот **2**, являющихся хелатами ионов  $\text{Tb}^{3+}$ . В ходе синтеза новых соединений **2** были применены модификации реакции Фриделя-Крафтса, кросс-сочетания Сузуки, метода Кардагана и др. В результате люминесцентно-спектральных исследований комплексов карбазолсодержащих соединений **1** и **2** с РЗЭ была показана возможность их дальнейшего применения в иммунофлуоресцентном анализе.

## Литература

1. Kostryukova T. S., Vasil'ev N.V. et al. *Rus. Journal of Bioorganic Chemistry*, 2015, **41**(2), 186.
2. Pugachov D.E., Kostryukova T. S. et al. *Rus. Journal of General Chemistry*, 2019, **89**(5), 965.
3. Pugachov D.E., Kostryukova T. S. et al. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 2018, **54**(5), 528.

# ПРЯМОЕ ЗАМЕЩЕНИЕ АТОМА ХАЛЬКОГЕНА В ХАЛЬКОГЕН-АЗОТИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛАХ

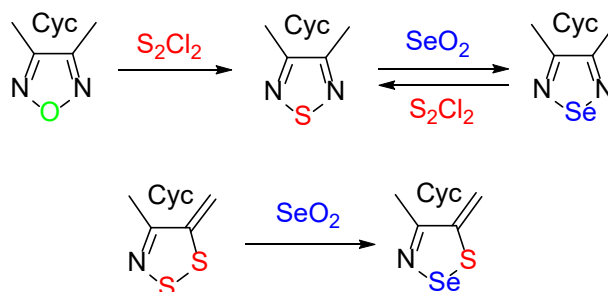
[Ракитин О.А.](#)<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
 119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
 e-mail: orakitin@ioc.ac.ru

<sup>б</sup>НОЦ «Нанотехнологии», Южно-Уральский Государственный Университет, проспект В.И. Ленина  
 76, Челябинск, 454080, Россия

Проблема прямого превращения одного элемента в другой занимает важное место в умах людей начиная с возникновения алхимии. В 20 веке наиболее интересной для химиков-органиков, работающих в области гетероциклической химии, стала замена одного атома на другой в гетероароматических циклах, которая позволяла в одну стадию получать их аналоги, модифицируя структуру соединения в нужном направлении. Известно, что химические, физические и биологические свойства гетероциклов могут кардинально меняться при изменении всего лишь одного гетероатома в молекуле. Несмотря на быстрый прогресс в разработке и исследовании функциональных материалов на основе халькоген-азотистых гетероциклических молекул для электроники и спинтроники, существует постоянный спрос на новые строительные блоки. В ходе своей работы мы пытались разработать новые, одностадийные и недорогие методы синтеза этих гетероциклов, чтобы сделать их доступными для изучения характеристик и создания новых материалов на их основе.<sup>1</sup> Оказалось, что одним из удобных подходов к этим соединениям является прямой обмен одного атома халькогена (кислорода, серы или селена) на другой (сера или селен).

В представленном сообщении будут рассмотрены известные примеры превращения конденсированных 1,2,5-халькогенадиазолов и 1,2,3-дителиазолов в другие халькогенсодержащие гетероциклы и перспективы развития этого направления.<sup>2</sup>



## Литература

1. Rakitin O.A., Zibarev A.V. *Asian J. Org. Chem.*, 2018, **7**, 2397.
2. Konstantinova L.S., Rakitin O.A. *Mendeleev Commun.*, 2021, **31**, № 4, DOI: 10.1016/j.mencom.2021.07.002

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, проект FENU-2020-0019 (2020072ГЗ).

# СИНТЕЗ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2-МЕРКАПТОБЕНЗИМИДАЗОЛА

[Рамазанова П.А.](#),<sup>1</sup> [Абакаров Г.М.](#)<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Дагестанский государственный университет, Россия,  
367000, Республика Дагестан, Махачкала, ул. Гаджиева, д. 43-а,  
[aurute1958@mail.ru](mailto:aurute1958@mail.ru)

<sup>2</sup> Дагестанский государственный технический университет,  
Россия, 367026, Республика Дагестан, Махачкала, просп. Имама Шамиля, д. 70,  
[oksanamd@yandex.ru](mailto:oksanamd@yandex.ru)

При взаимодействии 2-меркаптобензимидазола (1) с 2-хлорбензимидазолом (2) и 2-хлорбензотиазолом (4) в присутствии этилата натрия образуются соединения (3) и (5) с выходом 80%, 75% соответственно. В первом случае реакция протекает с образованием циклического продукта с участием Н-атома при атоме азота в имидазольном цикле (Схема 1).

Схема 1

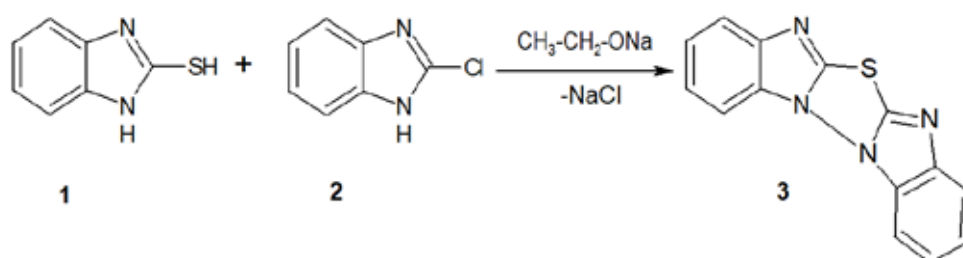
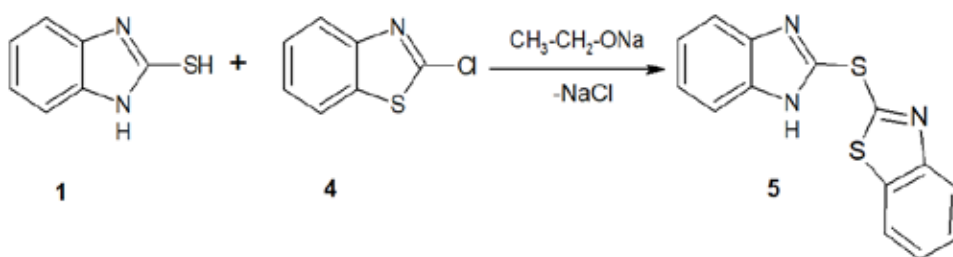


Схема 2



Соединения (3) и (5) были испытаны на биологическую активность. Наиболее выраженным эффектом является нарушение метаболизма печени на фоне стабилизации самой клеточной мембраны гепатоцитов.

Строение полученных соединений подтверждена данными ЯМР, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии и элементным анализом.

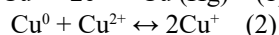
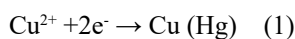
# ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В СИСТЕМЕ Cu(0)-Cu(II)-ИМИДАЗОЛ-ВОДА

**Рахимова М., Эшова Г.Б., Файзуллоев Э.Ф., Давлатшоева Дж.А., Кабутаршоева Н.У.**

*Химический факультет Таджикского национального университета,  
734025, Душанбе, проспект Рудаки, 17,  
e-mail: muboshira09@mail.ru*

Биокоординационная химия, которая успешно развивается в последние годы, изучает взаимодействия между биологически активными «металлами жизни» и не менее активными лигандами, например, имидазолом и его производными. Имидазол способен формировать с ионами металлов устойчивые комплексные соединения [1, 2]. Нашей задачей было изучение процессов образования координационных соединений Cu(II) с исследуемым лигандом методом окислительного потенциала [3].

В растворах между всеми возможными состояниями меди устанавливается равновесие:



Окислительный потенциал при этих условиях зависит только от трех переменных, т.е.

$$pH = -\lg a_{H^+}; \quad pC_{H_2L} = \lg C_{H_2L}; \quad pC_{Cu(II)} = \lg C_{Cu^{2+}} \quad (3)$$

Анализ экспериментальных кривых зависимостей окислительного потенциала от трех переменных показал образование в исследованной системе 5 комплексов, 4 из которых содержат гидроксильные группы во внутренней сфере:  $[\text{Cu}(\text{HL})_2]^{3+}$ ,  $[\text{CuHL}(\text{OH})]^{2+}$ ,  $[\text{Cu}(\text{HL})_2(\text{OH})]^{2+}$ ,  $[\text{Cu}_2(\text{HL})_2(\text{OH})_2]^{4+}$ ,  $[\text{Cu}_2(\text{HL})_2(\text{OH})_3]^{3+}$ . Они формируются и существуют в интервале  $pH$  от 1,0 до 10,0.

## Литература

1. Ульям Д. Металлы жизни / Д. Ульям - М: Мир, -1975. – 236 с.
2. Эй Хорна. Бионеорганическая химия / Под. ред. Эй Хорна. - М: Мир, -1978. –293 с.
3. Оксредметрия / Б.П Никольский [и др.] // -Л.: Химия. – 305 с.

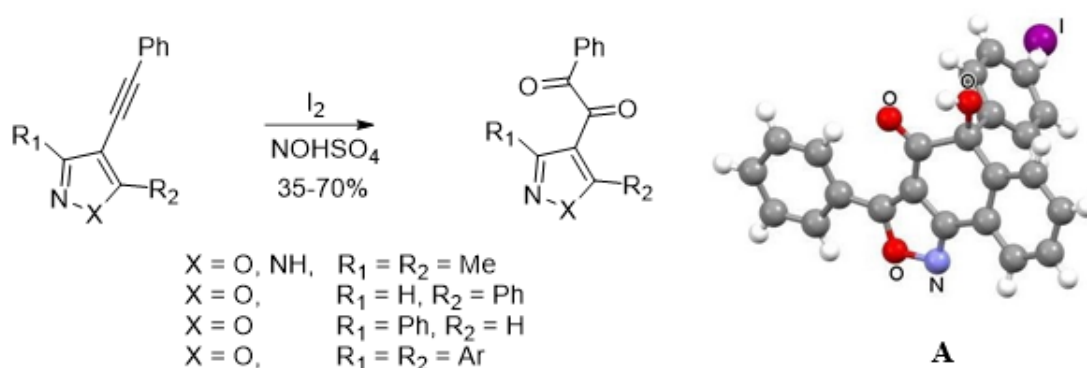
# ОКИСЛЕНИЕ ИНТЕРНАЛЬНЫХ ГЕТЕРОАРИЛАЛКИНОВ НИТРОЗИЛСЕРНОЙ КИСЛОТОЙ: СИНТЕЗ 1,2-ДИКЕТОНОВ С ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИМ ЗАМЕСТИТЕЛЕМ

Решмина О.Ю., Павлов А.И., Бондаренко О.Б.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,  
199991, Москва, Ленинские горы 1, с. 3,  
e-mail: reshmina@mail.ru

1,2-Дикетоны широко используются в органическом синтезе для получения гетероциклических, конденсированных циклических и полиароматических систем, а также биологически активных соединений<sup>1-3</sup>.

Одним из подходов к синтезу 1,2-дикетонов, в том числе содержащих гетероциклический заместитель, является окисление интернальных алкинов<sup>1,4</sup>. В настоящей работе предложены новые условия для получения несимметричных гетарилзамещенных 1,2-дикетонов окислением тройной связи в 4-алкинилизоксазолах и пиразолах нитрозилсерной кислотой в присутствии йода. Данный метод получения является простым и конкурентоспособным по сравнению с другими способами с точки зрения выходов 1,2-дикетонов и доступности исходных реагентов.



Найдено, что при взаимодействии 3,5-диарил-4-(2-фенилэтинил)-изоксазолов с нитрозилсерной кислотой в присутствии йода наряду с соответствующими 1,2-дикетонами образуются продукты аннелирования типа А с участием одного из арильных заместителей изоксазольного цикла.

## Литература

1. Yang W., Chen Y., Yao Y., Yang X., Lin Q., Yang, D. *J. Org. Chem.* 2019, **84**, 11080.
2. Walsh C.J., Mandal B.K. *J. Org. Chem.*, 1999, **64**, 6102.
3. Malamas M.S., Erdei J. et al. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 2011, **21**, 5164.
4. Yusubov M.S., Zholobova G.A., Vasilevsky S.F., Tretyakov E.V., Knight D.W. *Tetrahedron*. 2002, **58**, 1607.



# СИНТЕЗ 1,2,4-ТРИАЗОЛО[4,3-*a*]АЗИНОВ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНДУКТОРОВ HSF1

Серебренникова П.О.,<sup>а,б</sup> Утепова И.А.,<sup>а,б</sup> Мусихина А.А.,<sup>а,б</sup>  
 Чупахин О.Н.,<sup>а,б</sup> Гужова И.В.,<sup>в</sup> Пазникова Ю.А.,<sup>а,б</sup> Власова А.В.<sup>а,б</sup>

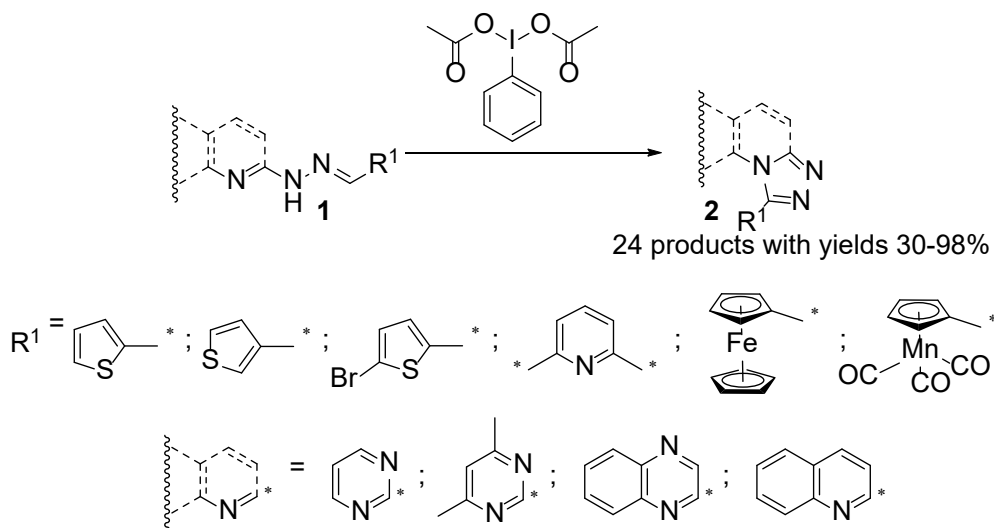
<sup>а</sup>Уральский Федеральный Университет, 620002, Екатеринбург, Мира 19  
 e-mail: p.o.serebrennikova@urfu.ru

<sup>б</sup>Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского, УрО РАН,  
 620108, Екатеринбург, С. Ковалевской 22/Академическая 20

<sup>в</sup>Институт цитологии РАН, 194064, Санкт-Петербург, Тихорецкий пр. 4

В настоящее время известен широкий спектр биологической активности аннелированных систем 1,2,4-триазола. Особый интерес представляют соединения, которые можно применять в лечении социально значимых заболеваний, таких как болезни Альцгеймера, Паркинсона и Хантингтона.

В результате проведенных исследований предложен метод окислительной кросс-дегидрогенизационной циклизации гетероциклических гидразонов до соответствующих 1,2,4-триазоло[4,3-*a*]азинов **2** в присутствии соединений гипервалентного иода(III).



Полученные 1,2,4-триазоло[4,3-*a*]азины **2** были исследованы в качестве индукторов HSF1. Перспективные результаты продемонстрировали хиноксалиновые производные **2**. Эти соединения увеличивали степень активации HSF1, индуцировали экспрессию Hsp70 и уменьшали образование агрегатов мутантного НТТ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта (№19-29-08037) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Государственный контракт № FEUZ-2020-0058 (H687/42Б.223/20).

# НОВЫЕ СИНТЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ПЕНТАЦИКЛИЧЕСКОМУ СКЕЛЕТУ ЛАМЕЛЛАРИНОВ И ЕГО ФРАГМЕНТАМ

**Сильянова Е.А., Самет А.В., Семенов В.В.**

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,  
119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: cea93@mail.ru*

Ламелларины, выделяемые из морских организмов, содержат в основе диарилпиррольное ядро. Они проявляют высокую противоопухолевую активность, а также способны преодолевать множественную лекарственную устойчивость.

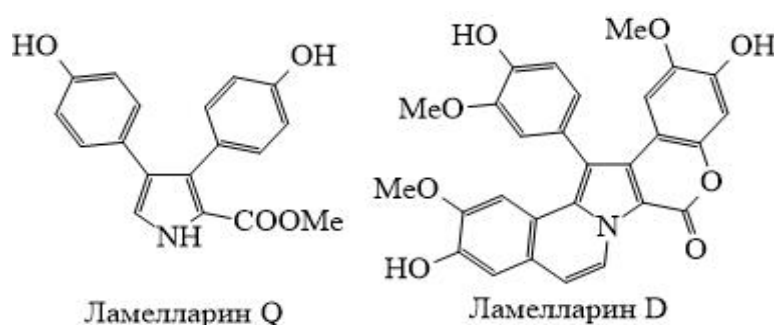
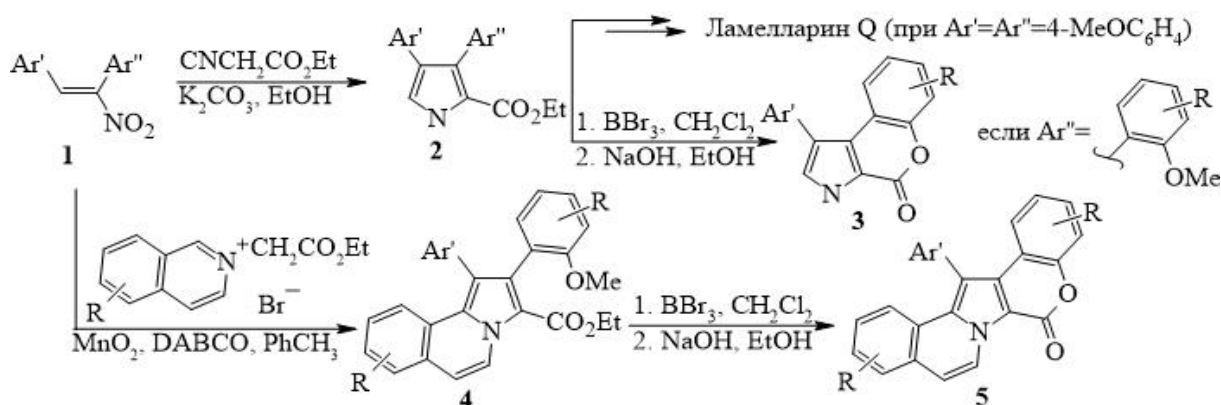


Рисунок 1. Структуры некоторых ламелларинов.

С помощью реакции Бартона-Зарда этилизоцианоацетата с нитростильбенами **1** был получен пирролокумариновый структурный фрагмент ламелларинов **3** и осуществлен полный синтез ламелларина Q за 3 стадии с общим выходом 35%. В результате реакции 3+2 диполярного циклоприсоединения изохинолинииевого илида с нитростильбенами **1** получен пентациклический каркас ламелларинов **5**.



Разработанные подходы позволяют эффективно синтезировать указанные структуры за минимальное число стадий.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 18-13-00044-П.

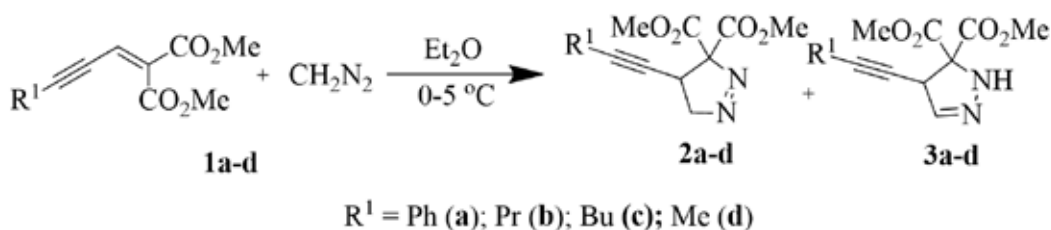
# АКТИВИРОВАННЫЕ ЕНИНЫ В СИНТЕЗЕ ПИРАЗОЛИНОВ

**Соков С.А.<sup>а,б</sup>, Злотский С.С.<sup>а</sup>, Один И.С.<sup>б</sup>, Голованов А.А.<sup>б</sup>**

<sup>а</sup>ФГБОУ ВО Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
450064, Уфа, ул. Космонавтов 1,  
e-mail: s.a.sokov.tltsu@gmail.com

<sup>б</sup>ФГБОУ ВО Тольяттинский государственный университет,  
445020, Тольятти, ул. Белорусская 14

Взаимодействие между диазосоединениями и ненасыщенными соединениями с образованием гетероциклических фрагментов является хорошо изученной темой<sup>1,2</sup>. Взаимодействие с полицентрическими молекулами, в частности с енинами в литературе практически не описано. Нами изучено взаимодействие ениновых производных диметилмалоната (**1a-d**) с эфирным раствором диазометана.



Так, соединения типа **1a-d**, ввиду поляризационного эффекта C=O групп, легко взаимодействуют с диазометаном специфически по двойной C=C связи. Пиразолины **2** и **3** образуются с высокими выходами (>95%). Соединение **3** представляет собой минорную примесь, чье содержание не превышает 10%. Отметим, что для приведенных пиразолинов невозможно зарегистрировать масс-спектры высокого разрешения, так как в условиях электроспрея происходит выделение азота. Строение полученных соединений однозначно доказано ЯМР-спектроскопией.

Показано, что реакция электронодефицитных 1,3-енинов с диазометаном без катализаторов или дополнительной обработки приводит к образованию азотсодержащих гетероциклов - пиразолинов.

## Литература

1. Khanova, M.D., Sultanova, R.M., Zlotskii, S.S., Dokichev, V.A., Tomilov, Y.V. *Russ. Chem. Bull.* **2005**, 54, 1003-1007
2. Golovanov, A.A., Gusev, D.M., Odin, I.S., Zlotskii, S.S. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2019**, 55, 333-348

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 20-33-80004/20.*

# ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ КОМПЛЕКСОВ ГЕТЕРОЦИКЛОВ С ВОДОЙ

**Спирин И.А., Гринвальд И.И., Капустин Р.В., Калинина А.А.**

*Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева  
603950, Россия, г.Нижний Новгород, ул.Минина, д.24  
ivan.sn.92@mail.ru*

Структура гетероциклических соединений привлекает к себе внимание исследователей, так как эти соединения имеют широкое применение в различных отраслях химической промышленности (органический синтез, катализ, производство фармацевтических препаратов, методы защиты от коррозии). С другой стороны, гетероциклические соединения широко распространены в живой природе и имеют важное значение в химии природных и биоактивных соединений. Присутствие воды в биологических объектах и во многих химико-технологических процессах приводит к структурным изменениям гетероциклических веществ при их взаимодействии с водой. Например, в таких системах может происходить межмолекулярный перенос протона. Механизм этих трансформаций изучен значительно меньше, по сравнению с внутримолекулярными, однако, перенос протона между молекулами определяет строение и свойства таких биологических объектов как мембраны, энзимы, молекулы ДНК.

В представленной работе была сформулирована задача зафиксировать при обычных условиях комплексы с водой и изучить механизм межмолекулярного переноса протона в системе, содержащей фуран, тиофен, 1,2,4-триазол методами ИК-спектроскопии. Такой выбор объектов определяется тем, что в рассмотренных системах могут реализоваться разные по характеру типы связывания в комплексах.

Перенос протона проявляется в ИК-спектрах в виде новых полос валентного колебания О-Н связи гидроксоний-катиона ( $\text{H}_3\text{O}^+$ ) в комплексе, которые смещены по отношению к поглощению ( $\text{H}_3\text{O}^+$ ) в спектрах воды ( $2330\text{-}2300\text{ см}^{-1}$ ). В спектрах тиофена и фурана новые полосы наблюдаются в среднечастотном диапазоне. Отнесения полос к валентным колебаниям О-Н связи в комплексе подтверждалось сравнением со спектрами систем, содержащих тяжелую воду. Образование комплексов фурана и тиофена с водой, происходит как по  $\pi$ -, так и по  $\sigma$ -механизму с участием неподеленной электронной пары гетероатома.

В спектре системы, содержащей воду и 1,2,4-триазол, при соотношении компонентов 1:1 зафиксированы две новые полосы с максимумами при  $3132$  и  $3211\text{ см}^{-1}$ , отнесенные нами к валентным колебаниям молекулы воды в комплексе. Новая полоса, отнесенная нами к валентному колебанию О-Н связи связанного гидроксоний-катиона, наблюдается при  $2140\text{ см}^{-1}$ . В отличие от комплексов фурана и тиофена, образование комплекса с гидроксоний-катионом в этой системе происходит за счет переноса подвижного атома водорода 1,2,4-триазола к молекуле воды.

# ОСОБЕННОСТИ ПРЕВРАЩЕНИЙ 3-АМИНОТИЕНО- И ФУРО[2,3-В]ПИРИДИН-2-КАРБОКСАМИДОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ N-ХЛОРСУКЦИНИМИДА

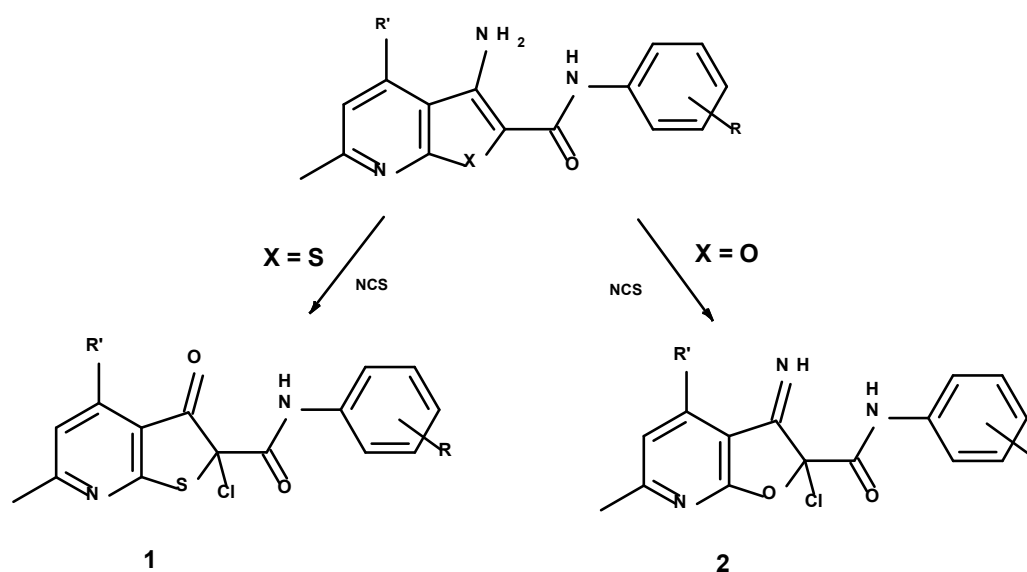
Строганова Т.А., Фараджева А.В., Василин В.К., Крапивин Г.Д.

*Кубанский государственный технологический университет,  
350072, г. Краснодар, ул. Московская, 2  
e-mail: tatka\_s@mail.ru*

3-Аминофуоро[2,3-б]пиридин-2-карбоксамиды являются гетероаналогами производных известной гетероциклической системы - 3-аминотиено[2,3-б]пиридина, однако, в отличие от последних, производным фуоропиридина посвящено гораздо меньшее количество работ.

Среди тиено- и фуоропиридинов обнаружены соединения, обладающие различными видами биологической активности, в частности, антибактериальной активностью в отношении Грам положительных бактерий, в т.ч. устойчивых к действию известных антибиотиков, противораковой активностью.

В докладе представлены результаты изучения взаимодействия 3-аминотиено- и фуоро[2,3-б]пиридин-2-карбоксамидов с N-хлорсукцинимидом (NCS). Установлено, что продуктами реакции вторичных амидов ряда тиенопиридина с NCS являются кетоны **1**, тогда как в случае амидов ряда фуоропиридина в качестве единственных продуктов с выходами 57-78% выделены имины **2**.



*Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект FZEZ-2020-0004).*

# СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ ГЕТАРИЛИНДОЛОВ В КАЧЕСТВЕ ПРЕПАРАТОВ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ НЕЙРОДЕГЕНЕРАТИВНЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

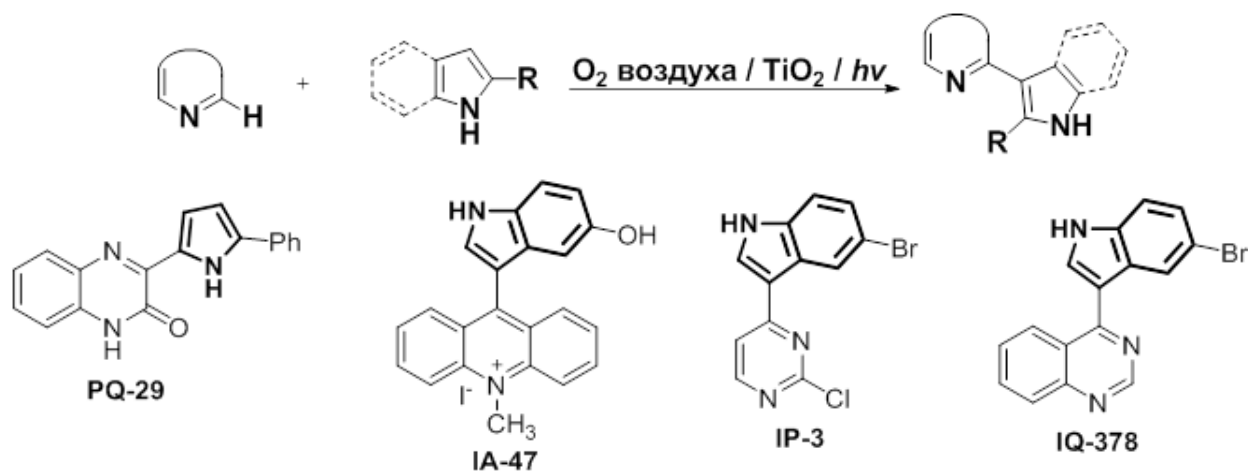
Трещова М.А.,<sup>а</sup> Утепова И.А.,<sup>а,б</sup> Дерингер С.А.,<sup>а</sup> Чупахин О.Н.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Уральский федеральный университет, 6  
20002, Екатеринбург, Мира, 28,  
e-mail: i.a.utepova@urfu.ru

<sup>б</sup>Институт органического синтеза УрО РАН,  
620990, Екатеринбург, С. Ковалевской, 22

Нейродегенеративные заболевания – это группа болезней с длительным началом, в основе которых лежат процессы, разрушающие клетки мозга. Хотя результаты многих исследований продемонстрировали, что клетки мозга продолжают восстанавливаться даже в пожилом возрасте, нормального процесса регенерации обычно недостаточно для восстановления дефектов ткани мозга после различных патологических повреждений. Молекулярные шапероны, в частности белок теплового шока Hsp70, являются основным элементом защиты клетки от стрессовых и патогенных факторов. Повышение уровня экспрессии Hsp70 в больных нейронах ведет к задержке развития заболевания, и индукторы экспрессии шаперона могут стать потенциальными лекарственными препаратами для борьбы с этими заболеваниями.

Было установлено, что соединения азинового ряда PQ-29, IA-47, IP-3, IQ-378 проявляют Hsp70-индуцирующие свойства.<sup>1,2</sup> Эффективность соединений в качестве лечебных препаратов обусловлен накоплением Hsp70 в клетках мозга, вызывая снижение активности каспазы-3 и подавление апоптоза, что способствует профилактике нейродегенеративных заболеваний.



## Литература

1. Dutysheva E.A., Mikeladze M.A., Trestsova M.A., Aksenov N.D., Utepova I.A., Mikhaylova E. R., et al. *Pharmaceutics*, 2020, **12**, 414.
2. Dutysheva E.A., Utepova I.A., Trestsova M.A., Anisimov A.S., Charushin V.N., Chupakhin O.N., Margulis B.A., Guzhova I.V., Lazarev V.F. *Eur. J. Med. Chem.* 2021, **222**, 113577.

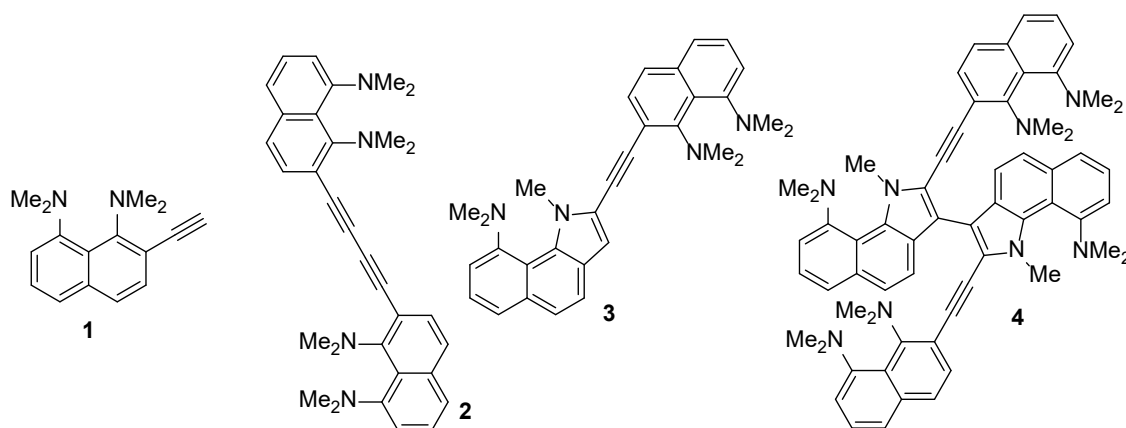
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты 20-33-70102, 20-03-00299.

# СИНТЕЗ И ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИИ 1,4-ДИАРИЛ-1,3-БУТАДИИНОВ НА ОСНОВЕ ПРОТОННОЙ ГУБКИ

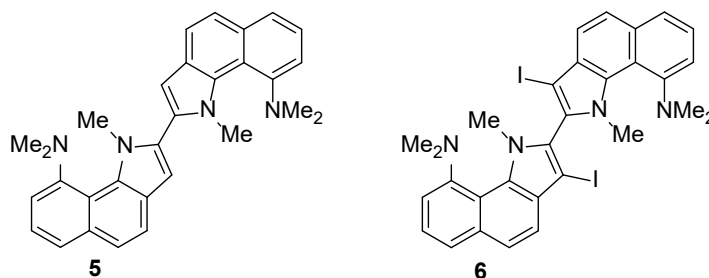
**Филатова Е.А., Рыбин Д.А., Гулевская А.В., Пожарский А.Ф.**

*Южный федеральный университет, химический факультет  
 344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Р. Зорге, 7;  
 e-mail: fea@sfedu.ru; pansha@rambler.ru.*

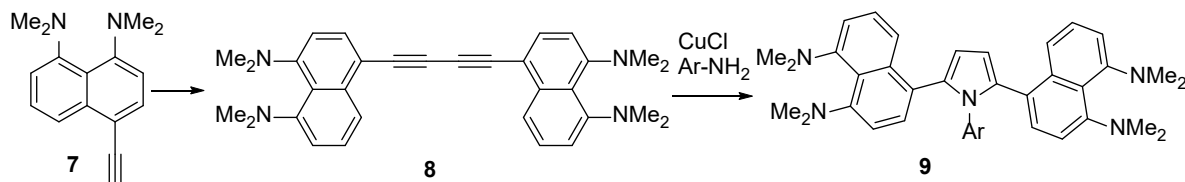
При введении 2-этинил-1,8-бис(диметиламино)нафталина **1** в реакцию Глазера-Хея, помимо целевого бутадиина **2** были получены бензо[g]индольные производные **3** и **4**.<sup>1,2</sup>



Исходя из бутадиина **2** были синтезированы дибензо[g]индолы **5**, **6**.



Путём окислительной димеризации алкина **7** получали бутадиин **8**, который вводили в гетероциклизацию с первичными аминами, получая N-арилпирролы, содержащие в положения 2,5-фрагменты протонной губки.



## Литература

1. Е. А. Filatova et al., J. Org. Chem., 2015, 80, 872–881.
2. Е. А. Filatova et al., Chem. Heterocycl. Compd., 2018, 54, 38-42.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (ГРАНТ 18-03-00083)*

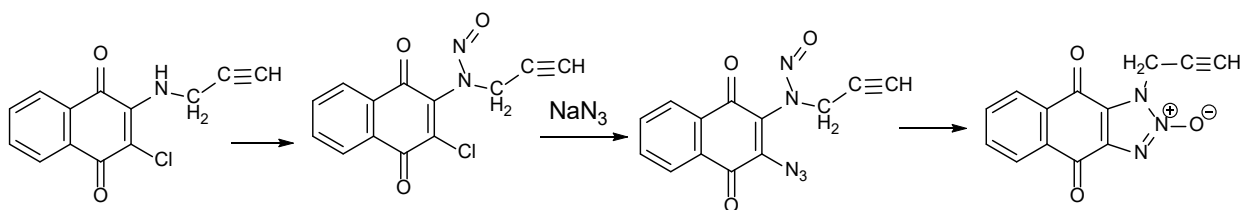
# СИНТЕЗ НОВЫХ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ НАФТОХИНОНОВ, ПЕРСПЕКТИВНЫХ ДЛЯ ИСПЫТАНИЯ ИХ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ

**Фоминых О.И.,** Гоманец А.С., Руденко Д.С., Руковец Т.А.,  
Ромашкова Ю.Г., Нуретдинова Э.В., Горностаев Л.М.

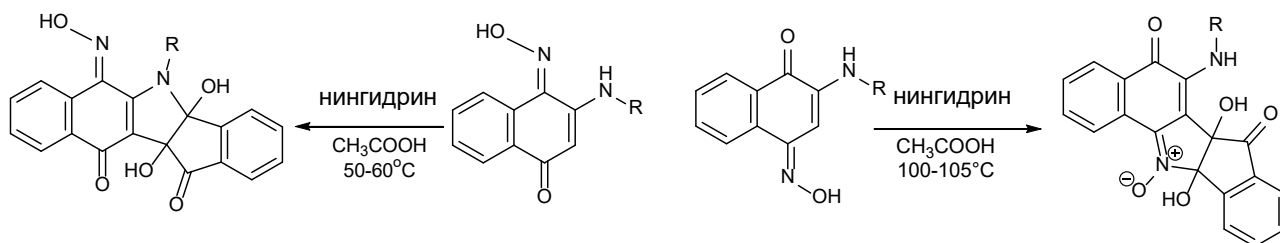
Красноярский государственный педагогический университет им. В.П. Астафьева,  
660049, Красноярск, ул. А. Лебедевой, 89  
E-mail: gornostaev@kspu.ru

Некоторые полициклические хиноидные соединения обладают противоопухолевой активностью<sup>1-3</sup>.

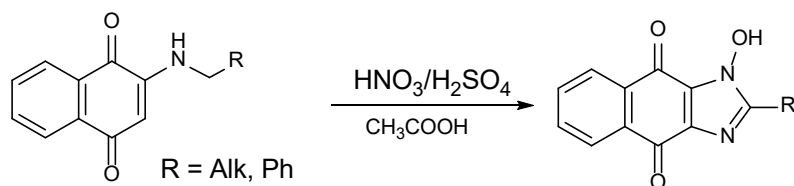
Нами обнаружены пути синтеза новых оригинальных производных нафтохинонов, перспективных для испытаний их биологической активности.



Новые группы производных 1,4-нафтохинонов синтезированы на основе реакций оксимов 1,4-нафтохинонов, содержащих в положении 2 или 3 алкиламиноруппу<sup>4</sup>.



На основе 2-бензил(алкил)амино-1,4-нафтохинонов и нитрующей смеси в уксусной кислоте получена группа 1-гидрокси-2-арил(алкил)-1Н-нафто[2,3-*d*]имидазол-4,9-дионов; изучены способы их функционализации<sup>5</sup>.



## Литература

1. Shchekotikhin A.E. *et al. Bioorg. Med. Chem.*, 2009, **17**, 1861.
2. Gornostaev L.M. *et al. Anti-Cancer Agents Med. Chem.*, 2017, **17**, 1814.
3. Горностаев Л.М., Фоминых О.И., Руковец Т. А., Лаврикова Т. И., Халявина Ю.Г., Штиль А.А., Шунаев А.В., Дунаев С.Ф., Мурашова Е.В., Чернышев В.В. *Химия гетероцикл. соед.*, 2020, **56**, 47.
4. Горностаев Л.М., Руденко Д.С., Руковец Т.А., Фоминых О.И., Ромашкова Ю.Г., Гатиллов Ю.В., Сильников В.Н. *Журнал органической химии*, 2021, **57**, 194.
5. Горностаев Л.М., Нуретдинова Э.В., Фоминых О.И., Ромашкова Ю.Г., Полещук О.Х. *Бутлеровские сообщения*, 2020, **64**, 1.



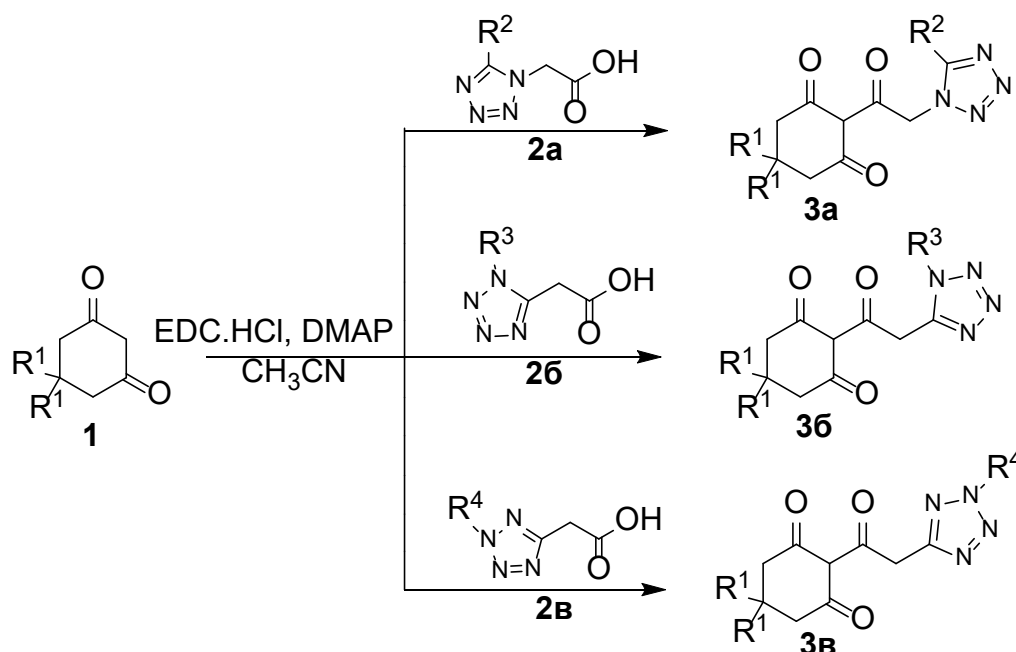
## СИНТЕЗ 2-(ТЕТРАЗОЛИЛАЦЕТИЛ)ЦИКЛОГЕКСАН-1,3-ДИОНОВ

[Хлебникова Т.С.](#),<sup>a</sup> [Зинович В.Г.](#),<sup>a</sup> [Пивень Ю.А.](#),<sup>a</sup> [Лахвич Ф.А.](#),<sup>a</sup> [Трифонов Р.Е.](#)<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Институт биоорганической химии Национальной академии наук Беларуси,  
220141, Минск, ул. Акад. Купревича 5/2, Республика Беларусь  
e-mail: khlebnicova@iboch.by*

<sup>b</sup> *Санкт-Петербургский государственный технологический институт,  
190013, Санкт-Петербург, Московский пр. 26, Россия*

Распространенные в природе циклические β-трикетоны и их синтетические аналоги, обладающие широким спектром биологической активности, находят значительное применение в органическом синтезе, что связано с богатыми синтетическими возможностями β-трикарбонильной системы. Введение тетразольного цикла в структуру 2-ацилциклогексан-1,3-дионов будет способствовать получению новых классов биоактивных соединений.



Разработан и реализован метод синтеза 2-(тетразолилацетил)циклогексан-1,3-дионов **3a-в** путем С-ацилирования циклогексан-1,3-дионов **1** тетразолилукусными кислотами **2a-в** в присутствии гидрохлорида 1-этил-3-(3-диметиламинопропил)карбодиимида (EDC) и N,N-диметиламинопиридина (DMAP) в среде ацетонитрила при комнатной температуре.

*Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (проект X20P-226) и РФФИ (проект 20-53-00039-Bel\_a).*

# РЕАКЦИИ 6-(ГИДРОКСИМЕТИЛ)-2,2-ДИМЕТИЛ-1-АЗАСПИРО[4.4]НОНАНОВ С $\text{MsCl}$ И $\text{CCl}_4\text{-PPh}_3$

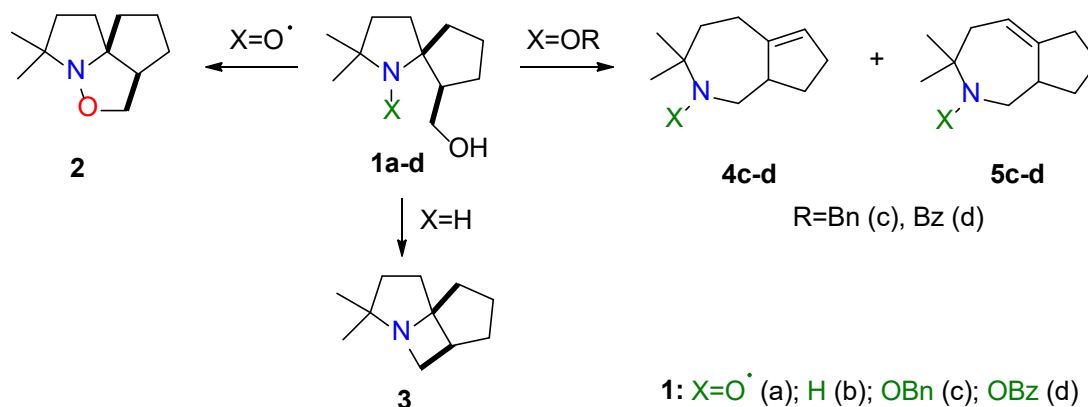
[Хорошунова Ю.В.](#),<sup>a,6</sup> Морозов Д.А.,<sup>6</sup> Кирилюк И.А.<sup>6</sup>

<sup>a</sup> Новосибирский Государственный Университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 1  
e-mail: [yulianna-1996@mail.ru](mailto:yulianna-1996@mail.ru)

<sup>6</sup> НИОХ СО РАН, 630090, Новосибирск, проспект Лаврентьева, 9

Мезилирование и реакция Аппеля широко используются для активации гидроксигруппы первичных спиртов к нуклеофильному замещению. Полученные мезилаты или галогениды далее легко вступают в  $\text{S}_{\text{N}}2$ -реакции, давая различные функциональные производные<sup>1,2</sup>.

Нами было показано, что реакции 6-(гидроксиметил)-2,2-диметил-1-азаспиро[4.4]нонанов **1a-d** с  $\text{MsCl}/\text{NEt}_3$  или  $\text{CBr}_4/\text{PPh}_3$  не приводят к ожидаемым мезилоксиметил- или бромометилпроизводным. В зависимости от заместителя X соединений **1a-d** при попытке активации гидроксигруппы наблюдаются необычные превращения: в случае нитроксильного радикала ( $\text{X}=\text{O}^\bullet$ ) продуктом реакции является изоксазолидин **2**, в случае незамещенного амина ( $\text{X}=\text{H}$ ) замыкается четырехчленный цикл с образованием напряженного амина **3**, а в случае бензилокси- ( $\text{X}=\text{OBn}$ ) или бензоилоксипроизводных ( $\text{X}=\text{OBz}$ ) происходят перегруппировки, приводящие к октагидроциклопента[с]азепиновому остову (соединения **4c-d** и **5c-d**).



## Литература

1. A. Sugawara et al. *Eur. J. Med. Chem.* 2018, **145**, 524-538.
2. N.J. Porter et al. *ACS Med. Chem. Lett.* 2018, **9**, 12, 1301-1305.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-53-76003 ЭРА\_a

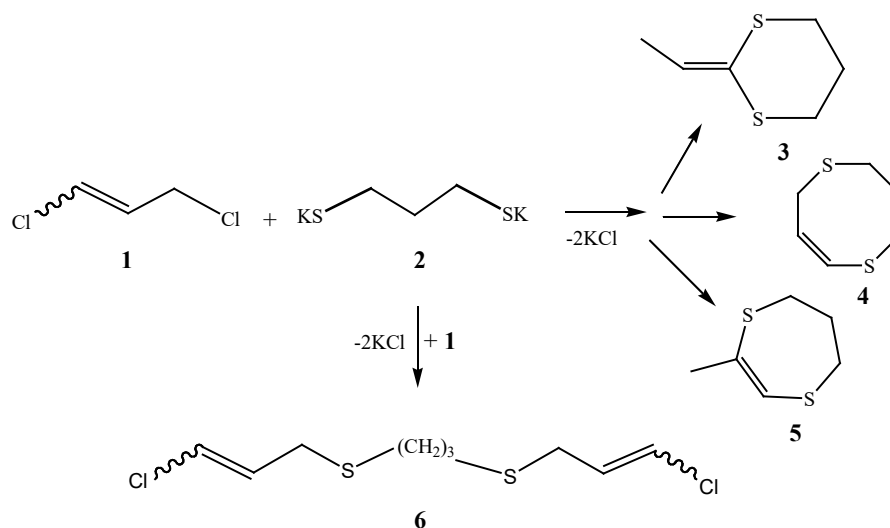
# КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ 1,3-ПРОПАНДИТИОЛЯТА КАЛИЯ С 1,3-ДИХЛОРПРОПЕНОМ В СИСТЕМЕ ГИДРАЗИНГИДРАТ-КОН

**Чиркина Е.А.**,<sup>а, б</sup> **Кривдин Л.Б.**,<sup>а, б</sup> **Никонова В.С.**,<sup>а</sup> **Грабельных В.А.**,<sup>а</sup>  
**Корчевин Н.А.**,<sup>а, б</sup> **Розенцвейг И. Б.**<sup>а</sup>

<sup>а</sup>ФГБУН «Иркутский институт химии им. А. Е. Фаворского СО РАН»,  
 Россия, 664033 Иркутск, ул. Фаворского, 1

<sup>б</sup>ФГБОУ «Ангарский государственный технический университет»,  
 Россия, 665835 Ангарск, ул. Чайковского, 60  
 e-mail: chirkina\_ea@mail.ru

В рамках теории функционала электронной плотности методом B3LYP/6-311++G(d,p) изучен механизм взаимодействия 1,3-дихлорпропена (1) с 1,3-пропандитиолятом калия (2) в системе гидразингидрат–КОН<sup>1</sup>:



Показано, что первой стадией данного взаимодействия является замещение атома хлора, находящегося у  $sp^3$ -гибридизованного атома углерода 1,3-дихлорпропена, на один из атомов серы 1,3-пропандитиолята с образованием продукта монозамещения. Дальнейшие превращения полученного монопроизводного могут приводить к образованию шести-, семи- и восьмичленных гетероциклических соединений (3-5), а также линейной структуры (6) в результате взаимодействия монопродукта со второй молекулой реагента.

## Литература

1. Levanova E.P., Grabelnykh V.A., Vahrina V.S., Albanov A.I., Klyba L.V., Russavskaya N.V., Korchevin N.A., Rozentsveig I.B. *J. Sulfur Chem.* 2014, **35**, 179–187.

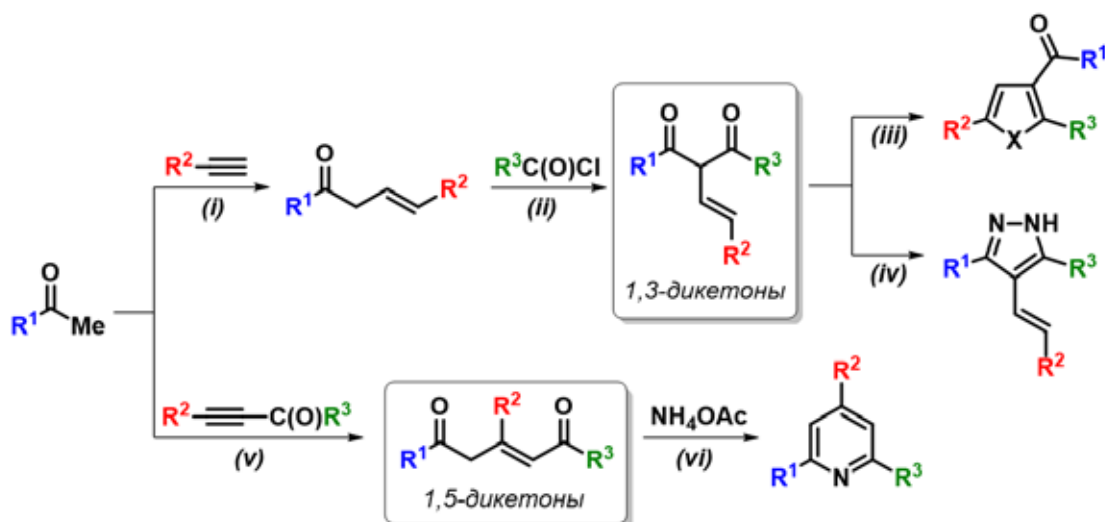
# РЕАКЦИЯ С-ВИНИЛИРОВАНИЯ КЕТОНОВ КАК ОСНОВА СИНТЕЗА ПОЛИАРИЛИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Шабалин Д.А., Дворко М.Ю.

Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского  
Сибирского отделения Российской академии наук, 664033, Иркутск, ул. Фаворского 1,  
e-mail: shabalin.chemistry@gmail.com

Полиариллированные гетероциклы являются важными структурными элементами в дизайне биологически активных соединений и инновационных материалов.<sup>1</sup>

Реакция С-винилирования кетонов ацетиленами в суперосновных средах, завершающаяся образованием β,γ-этиленовых кетонов, на сегодняшний день широко используется как основа синтеза разнообразных карбо- и гетероциклических систем.<sup>2</sup> В докладе обсуждаются результаты успешного применения реакции С-винилирования кетонов в качестве платформы для синтеза 1,3- и 1,5-дикетонов – ценных синтонов в синтезе полиариллированных фуранов,<sup>3</sup> тиофенов,<sup>3</sup> пиразолов<sup>3</sup> и пиридинов.<sup>4</sup>



(i) *t*-BuOK, DMSO, 100 °C, 0.5 ч; (ii) MgBr<sub>2</sub>·OEt<sub>2</sub>, DIPEA, DCM, rt, 1 ч; (iii) для X = O: NBS, AlCl<sub>3</sub>, MeCN, 80 °C, 6 ч, для X = S: S<sub>8</sub>, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, DMSO, 95 °C, 16 ч; (iv) NH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O, TFA, EtOH, rt, 2 ч; (v) *t*-BuOK, DMSO, rt или 60 °C, 0.5 ч; (vi) 60-80 °C, 5-8 ч

## Литература

1. Suzuki S., Yamaguchi J. *Chem. Commun.*, 2017, **53**, 1568.
2. Trofimov B.A., Schmidt E.Yu. *Acc. Chem. Res.*, 2018, **51**, 1117.
3. Shabalin D.A., Ivanova E.V., Ushakov I.A., Schmidt E.Yu., Trofimov B.A. *J. Org. Chem.*, 2020, **85**, 8429.
4. Shabalin D.A., Dvorko M.Yu., Schmidt E.Yu., Trofimov B.A. *Org. Biomol. Chem.*, 2021, **19**, 2703.

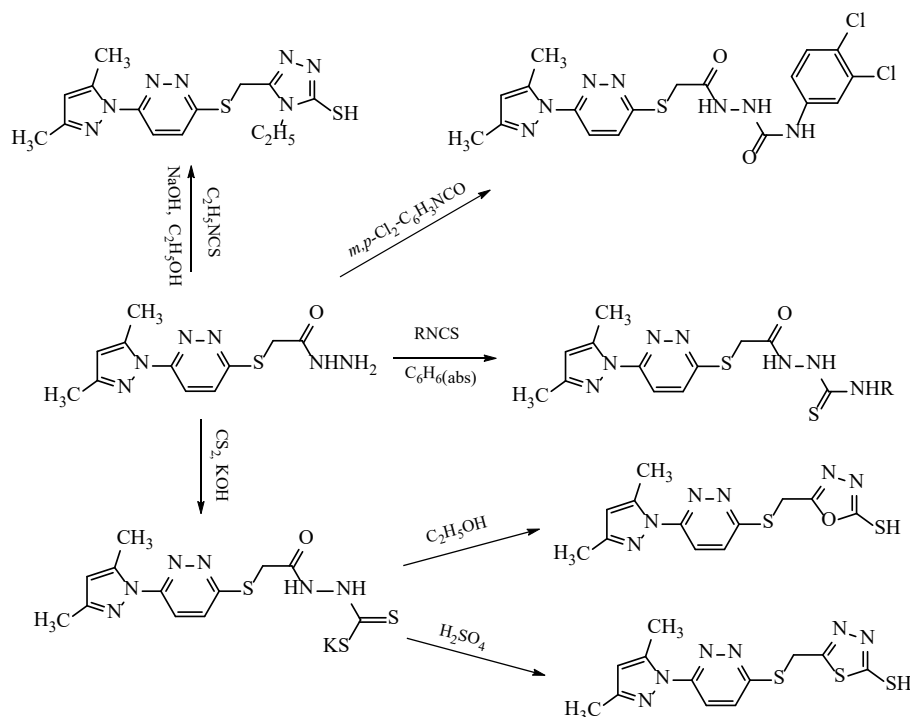
# СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ 2-((6-(3,5-ДИМЕТИЛ-1Н-ПИРАЗОЛ-1-ИЛ)ПИРИДАЗИН-3-ИЛ) ТИО)АЦЕТОГИДРАЗИДА

**Шайнова Р.С.,<sup>а</sup> Гомкцян Т.А.,<sup>а</sup> Карапетян А.В.,<sup>а</sup> Енгоян А.П.<sup>а,б</sup>**

<sup>а</sup>Национальный аграрный университет Армении, 0009, Ереван, Теряна 74  
e-mail: rozetta\_11@mail.ru

<sup>б</sup> ГОУ ВПО Российско-Армянский университет, О.Эмина 123, Ереван, 0051, Армения

Производные пиразолилпиридазина проявляют широкий спектр биологической активности<sup>1-4</sup>. Помимо этого пиразол и пиридазин входят в состав многих химических средств защиты и регуляторов роста сельскохозяйственных культур. Синтезированные на базе 2-((6-(3,5-диметил-1Н-пиразол-1-ил)-пиридазин-3-ил)тио)ацетогидразида новые производные проявили выраженное стимулирующее действие на рост растений. Наиболее активные соединения отобраны для дальнейших полевых испытаний.



## Литература

1. Ellis G.P., West G.B. *Progress in medicinal chemistry*, 1990, **27**, 398.
2. Sayed G.H., Hamed A.A., Meligi G.A., Boraie W.E., Shafik M. *Molecules*, 2003, **8**, 322.
3. Ather A.Q., Muhammad F.C. Khan N., Aparecida E., Bueno S., Khan M.A., Aslam N., Khan K.M., Athar M.M., Munawar M.A., Ashraf M. *Asian J. Chem.*, 2013, **25**, 7743.
4. Abdel-Ghani E., Assy M.G., Moustafa H.Y. *Monatsh. Chem.* 1995, **126**, 1265.

# РЕАКЦИИ S-ЦИКЛИЗАЦИИ 1H-КСАНТЕН-1-ОНОВ С УЧАСТИЕМ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИ АКТИВИРОВАННОГО СЕРОВОДОРОДА

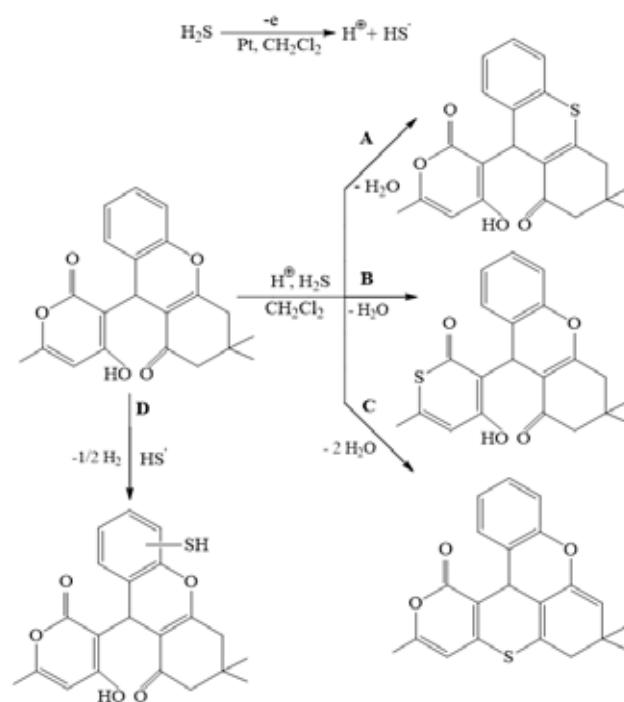
Шинкарь Е.В.,<sup>а</sup> Кострицкий А.Ю.,<sup>б</sup> Лоцманова В.В.,<sup>а</sup> Федотова О.В.,<sup>б</sup> Берберова Н.Т.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Астраханский государственный технический университет, 414056, Астрахань, ул. Татищева 16  
e-mail: elenshin@rambler.ru

<sup>б</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», 410012, Саратов, ул. Астраханская 83

Современным тенденциям в химии кислород- и серосодержащих полифункциональных бензоаннелированных гетероциклических соединений посвящено достаточно много исследований ввиду их высокой биологической активности и широкого практического применения<sup>1</sup>.

В работе смоделированы реакции 9-(4-гидрокси-6-метил-2-оксо-5,6-дигидро-2H-пиран-3-ил)-3,3-диметил-2,3,4,9-тетрагидро-1H-ксантен-1-он **1** и 9-(4-гидрокси-2-оксо-2H-хромен-3-ил)-3,3-диметил-2,3,4,9-тетрагидро-1H-ксантен-1-он **2** с H<sub>2</sub>S в условиях его анодной активации.



Методом ЦВА изучены основные направления превращений (A-D) соединений **1**, **2**, протекающих через стадию одноэлектронного окисления H<sub>2</sub>S до катион-радикала на Pt-аноде в органическом растворителе, и влияние различных факторов на эффективность электросинтеза.

## Литература

1. Makhova N.N., Belen'kii L.I. [et al.] *Rus. Chem. Rev.*, 2020, **89**(1), 55.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-03-00446а.

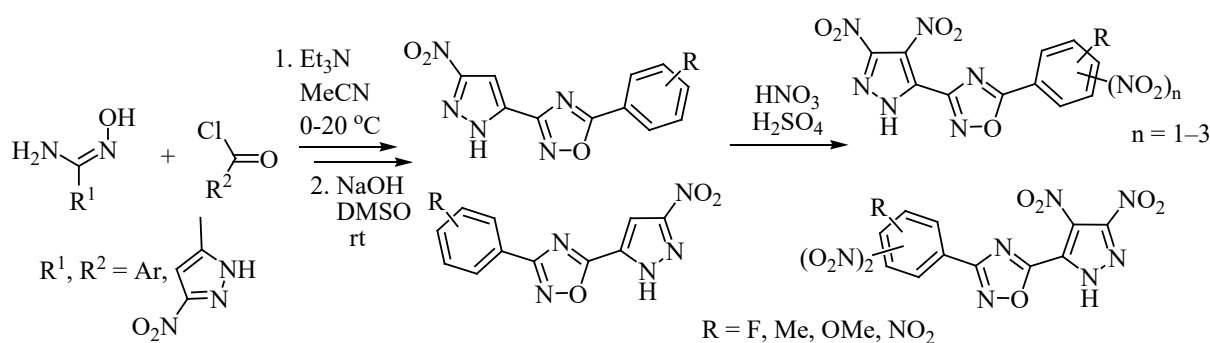
# СИНТЕЗ НИТРОПРОИЗВОДНЫХ 3(5)-АРИЛ-5(3)-ПИРАЗОЛИЛ-1,2,4-ОКСАДИАЗОЛОВ

**Шкинева Т.К., Вацадзе И.А., Хоранян Т.Э., Липилин Д.Л., Далингер И.Л.**

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,  
119991, Москва, Ленинский пр., 47,  
e-mail: tanya\_shkineva@mail.ru*

Производные 1,2,4-оксадиазолов играют важную роль в медицинской химии благодаря широкому спектру их фармакологической активности. Развивающаяся область применения 1,2,4-оксадиазолов в качестве энергетических материалов также увеличивает потребность в эффективных и универсальных методах синтеза таких соединений.

Нами разработан двухстадийный метод синтеза изомерных нитро-производных 3(5)-арил-5(3)-пиразолил-1,2,4-оксадиазолов, основанный на ацилировании хлорангидами арил- и пиразолкарбоновых кислот соответствующих амидоксимов в системе  $\text{Et}_3\text{N}$  / MeCN, с последующей мягкой циклизацией образовавшихся *O*-ацетамидоксимов суперосновной системой NaOH / DMSO. В результате впервые получены нитропиразолил-1,2,4-оксадиазолы, содержащие различные заместители в арильном цикле, причем арильный заместитель может находиться как в положении 3 оксадиазольного цикла, так и в положении 5.



С целью дальнейшей функционализации полученных 1,2,4-окса-диазолов впервые систематически изучено их кислотное нитрование. Показано, что в серно-азотной смеси при комнатной температуре возможно введение от 1 до 3 нитрогрупп в арильный фрагмент. Нитрование при 80 °С приводит к введению дополнительной нитрогруппы в положение 4 пиразольного фрагмента.

## Литература

1. Шкинева Т.К., Вацадзе И.А., Хоранян Т.Э., Липилин Д.Л., Пивкина А.Н., Далингер И.Л. *Химия гетероцикл. соединений*, 2021, **57**, № 7.

*Авторы благодарят программу развития Научных Школ ИОХ РАН*

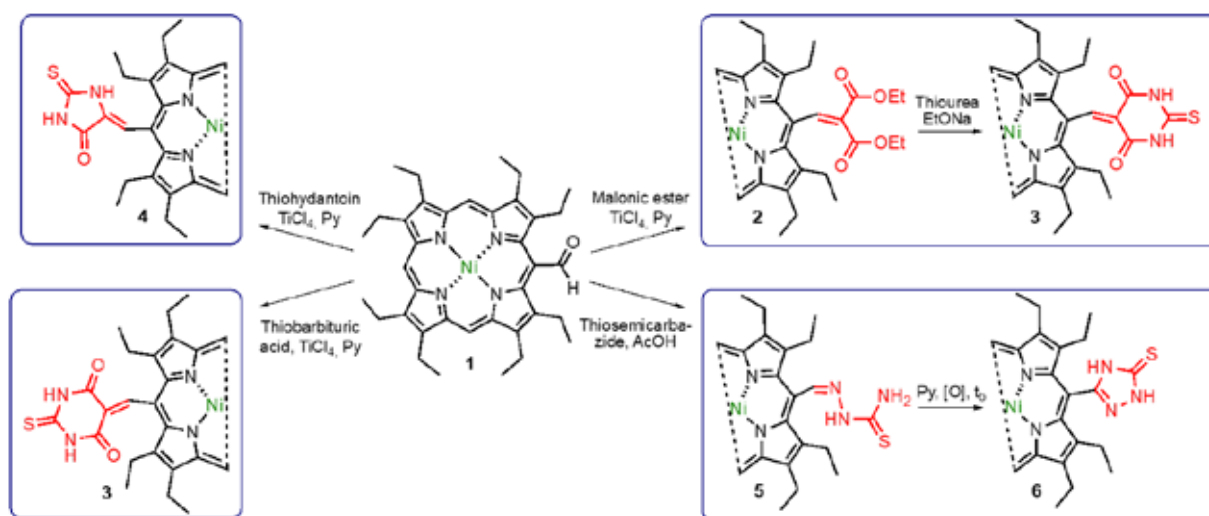
# СИНТЕЗ КОНЬЮГАТОВ $\beta$ -АЛКИЛПОРФИРИНОВ С ГЕТЕРОЦИКЛАМИ, СОДЕРЖАЩИМИ ФРАГМЕНТЫ ТИОМОЧЕВИНЫ И ТИОСЕМИКАРБАЗИДА

Шкирдова А.О., Орлова Е.А., Пономарёв Г.В., Тюрин В.С., Замилацков И.А.

*Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина  
Российской Академии Наук, Ленинский проспект 31, к.4, 119071, Москва;  
e-mail: shkirdova95@mail.ru*

Важнейшей задачей медицинской диагностики является измерение концентрации кислорода и рН в клетках и тканях. Это можно осуществить, используя оптические сенсоры<sup>1</sup>, которые позволяют измерять уровни O<sub>2</sub> и рН в живых клетках при определенных физиологических условиях для определения их «метаболической сигнатуры» или Энергетического Баланса Клетки (ЭБК)<sup>2</sup>. Данные по распределению кислорода и рН в тканях позволяют диагностировать многие заболевания, в частности, опухолевые.

При попытке получить соединения, обладающие сенсорными свойствами, нами были разработаны и оптимизированы два метода синтеза конъюгатов  $\beta$ -октаэтилпорфирина с серосодержащими гетероциклами. Для этого была использована реакция Кневенагеля мезо-формил-Ni(II)- $\beta$ -октаэтилпорфирина **1** с малоновым эфиром, тиобарбитуровой кислотой и тиогидантоином, в результате чего были получены соответствующие соединения **2-4**. Последующая циклизация соединений **2** и **5** привела к образованию конъюгатов **3** и **6** соответственно.



## Литература

1. D.A. Ferrick, A. Neilson, C. Beeson. *Drug Discovery Today*, **2008**, 13(5–6), 268-274.
2. A. Zhdanov, C. Favre, L. O'Flaherty, J. Adam, R. O'Connor, P. Pollard, D. Papkovsky. *Integrative Biology*, **2011**, 3(11), 1135-1142.

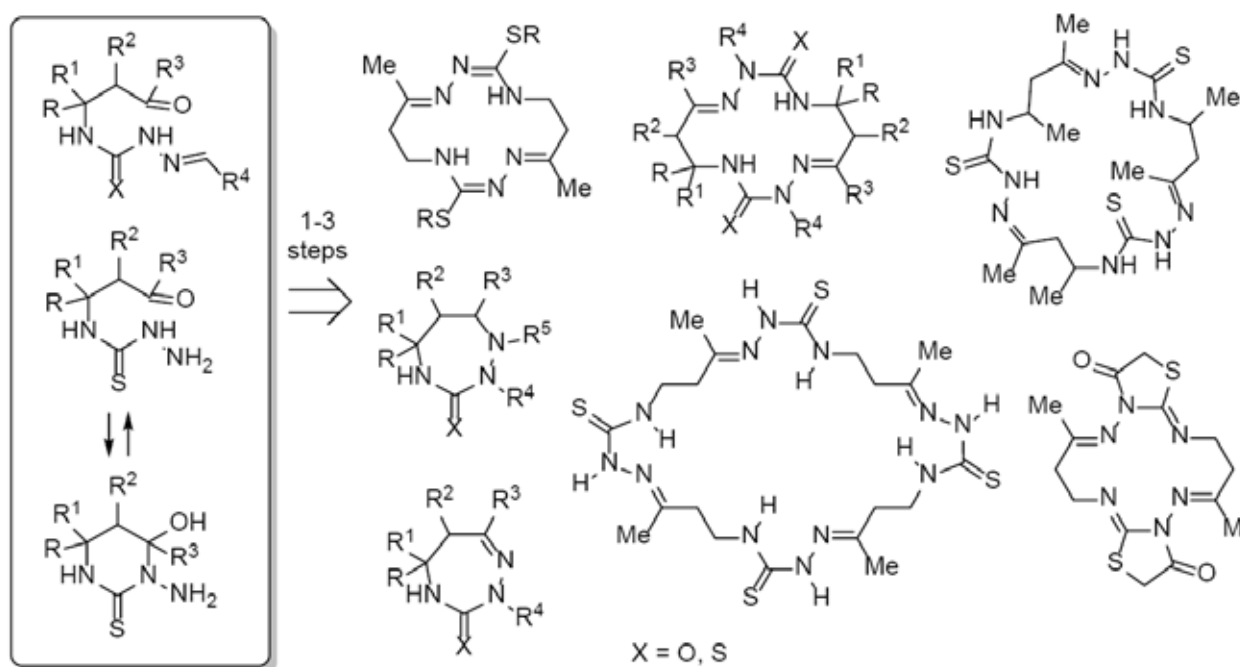


# ЦИКЛИЗАЦИЯ И ЦИКЛООЛИГОМЕРИЗАЦИЯ 4-(Г-ОКСОАЛКИЛ)(ТИО)СЕМИКАРБАЗИДОВ И ИХ ПРОИЗВОДНЫХ – ЭФФЕКТИВНЫЙ ПУТЬ К 7-, 14-, 21- И 28-ЧЛЕННЫМ ПОЛИАЗАГЕТЕРОЦИКЛАМ

Шуталев А.Д., Фесенко А.А., Кувакин А.С.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского  
Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 47,  
e-mail: shad@ioc.ac.ru*

Создание новых общих подходов к редким классам гетероциклов является одним из важнейших направлений развития химии гетероциклических соединений. К таким классам гетероциклов принадлежат, в частности, 7-членные циклические (тио)семикарбазоны и их макроциклические аналоги. В настоящей работе мы описываем ряд универсальных направленных синтезов широкого набора таких соединений, некоторые из которых представлены ниже.



В качестве ключевых исходных соединений в синтезах указанных типов гетероциклов служили 4-(γ-оксоалкил)семикарбазоны и -тиосемикарбазоны, а также 4-(γ-оксоалкил)тиосемикарбазиды и/или их циклические изомеры пиримидинового ряда, для которых нами разработаны эффективные методы их получения. Полученные соединения в 1-3 стадии были направленно превращены в различные 7-, 14-, 21- и 28-членные полиазамакроциклы. Показано, что их 14-членные представители являются эффективными тетраденатными лигандами для катионов переходных металлов - Ni(II), Cu(II) и Pd(II).

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект АНФ\_а 20-53-14002.*

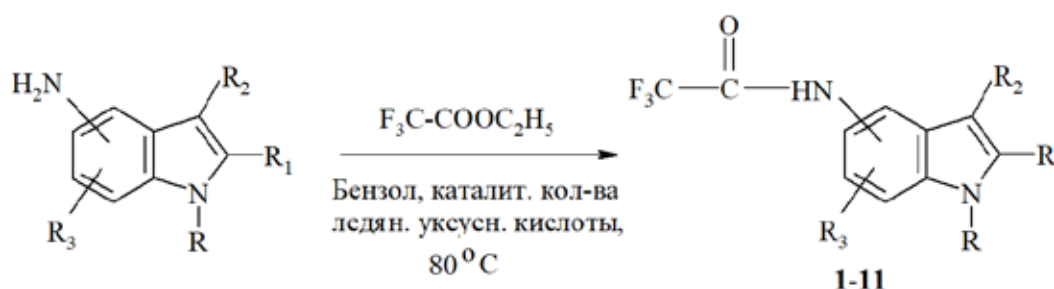
# ИНДОЛИЛ(ТРИФТОРМЕТИЛ)АЦЕТАМИДЫ С ПРОТИВОМИКРОБНЫМ ДЕЙСТВИЕМ НА ОСНОВЕ 1*H*-ИНДОЛ-5-, 6-, 7-ИЛАМИНОВ

**Ямашкин С.А., Степаненко И.С.**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО Мордовский государственный педагогический университет им. М.Е. Евсевьева,  
Саранск, Россия (430007, Саранск, ул. Студенческая, 11а),  
e-mail: yamashk@yandex.ru

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарева,  
Саранск, Россия  
e-mail: ymahkina@mail.ru

Мы проводим поиск новых соединений с противомикробной активностью на основе 1*H*-индолиламинов [1,2]. При этом получена серия трифторметилсодержащих производных 1*H*-индол-5-,6-,7-иламинов – амиды (**1-11**), которые согласно лабораторному биоскринингу проявляют противомикробное действие, сравнимое с препаратом диоксидином.



**1** R=R<sub>3</sub>=H, R<sub>1</sub>=R<sub>2</sub>=CH<sub>3</sub>, 7-NH; **2** R<sub>3</sub>=H, R=R<sub>1</sub>=R<sub>2</sub>=CH<sub>3</sub>, 7-NH; **3** R=H, R<sub>1</sub>=R<sub>2</sub>=CH<sub>3</sub>; 5-CH<sub>3</sub>, 6-NH;  
**4** R=R<sub>1</sub>=R<sub>2</sub>=CH<sub>3</sub>, 5-CH<sub>3</sub>, 6-NH; **5** R=H, R<sub>1</sub>=R<sub>2</sub>=CH<sub>3</sub>, 5-OCH<sub>3</sub>, 6-NH; **6** R=R<sub>1</sub>=R<sub>2</sub>=CH<sub>3</sub>, 5-OCH<sub>3</sub>, 6-NH;  
**7** R=R<sub>3</sub>=H, R<sub>1</sub>=R<sub>2</sub>=CH<sub>3</sub>, 5-NH; **8** R<sub>3</sub>=H, R=R<sub>1</sub>=R<sub>2</sub>=CH<sub>3</sub>, 5-NH; **9** R=R<sub>2</sub>=R<sub>3</sub>=H; R<sub>1</sub>=C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, 5-NH;  
**10** R=CH<sub>3</sub>, R<sub>2</sub>=R<sub>3</sub>=H; R<sub>1</sub>=C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, 5-NH; **11** R=R<sub>2</sub>=R<sub>3</sub>=H, R<sub>1</sub>=CH<sub>3</sub>, 5-NH;

Самая высокая активность обнаружена у *N*-(1*H*-индол-6-ил)-2,2,2-трифторацетамида не метилированного по пиррольному азоту с 5-CH<sub>3</sub>O-группой в бензольном кольце (**5**) и у представителя *N*-(1*H*-индол-5-ил)-2,2,2-трифторацетамидов (**9**) с 2-фенильной группой в пиррольном кольце. В условиях электронной ионизации для амидов найдены тонкие индивидуальные особенности их масс-спектральной фрагментации.

## Литература

1. Степаненко И.С., Ямашкин С.А. Патент 2675806 РФ, 2018.
2. Степаненко И.С., Ямашкин С.А., Котыкин А.И., Юровская М.А. *Вестн. Моск. Ун-т. Серия 2. Химия*, 2019, 60, № 5, 35.

## Авторский указатель

Abilova U.M.	322	Байков С.В.	166	Вацадзе С.З.	34
Bakulev V.A.	27	Балакирев Д.О.	167	Великородов А.В.	331
Begimova G.U.	172	Балова И.А.	28	Верещагина Я.А.	178
Glushkov V.A.	188	Баранов Д.С.	85	Виль В.А.	94
Krasavin M.	48	Барская Е.С.	168	Виноградов Д.Б.	179
Ovcharenko V.	13	Басанова Е.И.	169	Виноградова Е.Е.	180
Абаев В.Т.	21	Басова Т.В.	86	Волчо К.П.	35
Абель А.С.	79	Бастраков М.А.	327	Воробьев А.Ю.	181
Абрамов В.А.	157	Баулина Т.В.	170	Воробьев С.В.	182
Аверин А.Д.	22	Бахманова Ф.Н.	328	Воробьева Д.В.	183
Агарков А.С.	80	Беганцова Ю.Е.	171	Ворожцов Н.И.	95
Аксенов А.В.	23	Белецкая И.П.	7	Ворона С.В.	184
Аксенов Д.А.	81	Белоглазкина Е.К.	29	Воронин В.В.	185
Аксенов Н.А.	24	Бельская Н.П.	87	Воскресенский Л.Г.	36
Акулов А.А.	82	Бобоев М.У.	329	Гаврилова Е.Л.	334
Аласади Рахман Тама	158	Болотин Д.С.	88	Газиева Г.А.	96
Алгаева Н.Э.	159	Бонегардт Д.В.	173	Газизов А.С.	37
Алдошин А.С.	83	Борисова К.Л.	330	Галеев А.Р.	186
Александрова Е.В.	160	Борщев О.В.	89	Герасимова Д.П.	187
Александрова Н.А.	323	Брель В.К.	30	Глухарева Т.В.	97
Анаников В.П.	6	Бровкова М.В.	174	Глушко В.Н.	335
Андреева О.В.	161	Брылев К.А.	31	Говди А.И.	98
Анпёнова Е.П.	324	Бугаенко Д.И.	90	Голованов А.А.	189
Антипин И.С.	9	Бургарт Я.В.	91	Голубенкова А.С.	190
Антонкин Н.С.	162	Бурилов А.Р.	32	Горбунова Ю.Г.	10
Арсеньев М.В.	163	Бурилов А.Р.	175	Грибанов П.С.	191
Арутюнов Н.А.	164	Бурмистров В.В.	176	Гриднев И.Д.	38
Арутюнян А.С.	325	Бурькина Ю.В.	92	Гришин И.Ю.	192
Астахов А.В.	165	Быстров Д.М.	177	Гук Д.А.	193
Ахметова В.Р.	84	Вараксин М.В.	93	Гусев Д.И.	194
Бабаев Е.В.	25	Василин В.К.	332	Дабаева В.В.	336
Багрянская Е.Г.	26	Васильев А.В.	33	Далингер А.И.	195
Баева Л.А.	326	Васильев Е.С.	333	Данагулян Г.Г.	39

## Авторский указатель

Данагулян Г.Г.	196	Касаткина С.О.	212	Ледовская М.С.	118
Данилкина Н.А.	99	Катеринич М.Д.	107	Лемпорт П.С.	119
Дарьин Д.В.	40	Качанов А.В.	342	Лидер Е.В.	225
Дашян Ш.Ш.	337	Кирилов Н.К.	108	Линькова Е.И.	346
Дильман А.Д.	41	Кирсанова А.А.	213	Лодочникова О.А.	226
Дмитриев М.В.	100	Климочкин Ю.Н.	46	Лукманова Д.Н.	227
Доценко В.В.	42	Клямер Д.Д.	214	Лукьянов Б.С.	347
Дубовцев А.Ю.	101	Коврижина А.Р.	215	Лупоносов Ю.Н.	120
Дьяченко В.С.	197	Койфман О.И.	47	Лысова С.С.	228
Дядищев И.В.	198	Колобов А.В.	109	Магдесиева Т.В.	51
Еремина Ю.А.	199	Колодина А.А.	110	Макарова Е.С.	348
Ермакова Е.А.	338	Колтун Д.С.	343	Мальшева А.С.	229
Ефимов И.В.	200	Коннова Г.Н.	216	Мальшакова М.В.	349
Жаркынбек Т.Е.	339	Корнев А.Н.	111	Малюга В.В.	230
Жилин Е.С.	201	Коротаев В.Ю.	112	Мамедов В.А.	52
Зайцев В.П.	102	Костюченко А.С.	113	Мамедова С.Ф.	231
Захарычев Д.В.	202	Кошечев Б.В.	217	Мартинкевич Д.С.	350
Злотин С.Г.	43	Кравцова А.А.	218	Масливец А.А.	232
Золотцев В.А.	340	Краснов В.П.	49	Масливец А.Н.	53
Иванов А.В.	44, 203	Красновская О.О.	114	Матвеевская В.В.	233
Иванова В.Н.	204	Кузнецов Д.Р.	219	Махрус Е.М.	351
Иванова Е.А.	206	Кузнецова Е.А.	220	Мендограло Е.Ю.	234
Иванова Е.Е.	205	Кузьмина А.А.	221	Миколайчук О.В.	235
Иванова О.А.	103	Кукушкин М.Е.	115	Микуленкова Э.А.	236
Иванова С.С.	207	Кулаков И.В.	344	Минеева И.В.	352
Иевлев М.Ю.	208	Кулюхина Д.С.	222	Миронов В.Ф.	54
Изместьев А.Н.	209	Курбангалиева А.Р.	50	Миронова И.А.	237
Ильков К.В.	210	Куренков И.А.	223	Митрофанов А.Ю.	121
Йошимура А.	104	Кушатов Т.А.	345	Михайленко М.В.	238
Казак М.К.	211	Қалдыбаева А.Б.	341	Мороз А.А.	239
Калинин А.А.	105	Ларин А.А.	116	Морозов Д.А.	353
Карасик А.А.	45	Ларионов В.А.	117	Мошкина Т.Н.	354
Каретников Г.Л.	106	Ларкович Р.В.	224	Музалевский В.М.	122

## Авторский указатель

Мукушева Г.К.	355	Панова Ю.С.	252	Ростовский Н.В.	138
Мусихина А.А.	356	Панфилов М.А.	253	Савчук М.И.	268, 269, 270
Мызников Л.В.	123	Панькова А.С.	130	Сагитуллина Г.П.	139
Назаров А.А.	124	Пароникян Е.Г.	364	Сайгитбаталова Е.Ш.	271
Назаров Д.И.	240	Пахомов Г.Л.	131	Сайфина А.Ф.	272
Назарова А.А.	357	Пелагеев Д.Н.	254	Салахутдинов Н.Ф.	14
Невоструев Д.А.	241	Першин А.А.	255	Салимова И.О.	273
Невская А.А.	242	Петров М.Л.	132	Салоутин В.И.	15
Немытов А.И.	358	Петров С.А.	133	Самсоненко А.Л.	274
Ненайденко В.Г.	11	Питушкин Д.А.	256	Санникова В.А.	275
Ненашев А.С.	125	Поздеев А.С.	257	Семенов Н.А.	140
Нечаев М.С.	55	Полежаева В.Д.	258	Сенникова В.В.	276
Никеров Д.С.	359	Поливанова А.Г.	365	Серебренникова П.О.	372
Никитин И.А.	243	Полинская М.С.	259	Сигеев А.С.	141
Никитина П.А.	244	Полковниченко М.С.	260	Сиднева В.В.	277
Никонова В.С.	245	Пономаренко С.А.	17	Силаева А.И.	278
Нифантьев Н.Э.	12	Попков С.В.	134	Сильянова Е.А.	373
Новиков М.С.	56	Попов А.В.	135	Скворцов И.А.	279
Новоторцев В.К.	246	Попова С.А.	261	Сколяпова А.Д.	142, 280
Нуркенов О.А.	360	Потапов И.Д.	262	Скоморохов А.А.	281
Обухов А.Е.	126	Пржевальский Н.М.	263	Скоротецкий М.С.	143
Обыденник А.Ю.	361	Прима Д.О.	136	Словеснова Н.В.	282
Овакимян А.А.	362	Примерова О.В.	264	Смирнова К.С.	283
Овчинников К.Л.	247	Прудникова А.Н.	366	Смолобочкин А.В.	284
Осипов Д.В.	127	Пугачёв Д.Е.	367	Соков С.А.	374
Осипов С.Н.	57	Радюш Е.А.	265	Солдатенко А.С.	285
Осянин В.А.	58	Ракитин О.А.	368	Соловьёва С.Е.	286
Павлов А.А.	128	Рамазанова П.А.	369	Солодовникова Т.А.	287
Павлов К.Г.	248	Рахимова М.	370	Сосновских В.Я.	60
Павлова М.А.	249	Решетников Д.В.	266	Спирин И.А.	375
Павловский В.И.	59, 250, 251	Решмина О.Ю.	371	Строганова Т.А.	376
Падня П.Л.	129	Ризбаева Т.С.	267	Стужин П.А.	61
Паламарчук И.В.	363	Родыгин К.С.	137	Суровцев Д.Ю.	288

## Авторский указатель

Суслов Е.В.	144	Хазипов О.В.	151	Шутков И.А.	316
Сухих А.С.	289	Харламова А.Д.	301	Щегольков Е.В.	154
Сухоруков А. Ю.	62	Хлебникова Т.С.	380	Щекотихин А.Е.	74
Сысолятин С.В.	63	Хорошилова О.В.	152	Щербаков С.В.	317
Терентьев А.О.	16	Хорошунова Ю.В.	381	Юсубов М.С.	75
Тесленко Ф.Е.	145	Цаплин Г.В.	302	Якушев А.А.	320
Тихомолова А.С.	290	Цукерман М.В.	303	Ямашкин С.А.	389
Томилов Ю.В.	64	Чаплыгин Д.А.	304	Ярёменко И.А.	155
Тресцова М.А.	377	Чепцов Д.А.	305	Яровая О.И.	76
Трифонов Р.Е.	65	Черненко А.Ю.	306	Яхваров Д.Г.	77
Трушков И.В.	66	Чернышев В.М.	70		
Турманов Р.	291	Чигорина Е.А.	318		
Тухтаев Х.Б.	146	Чиркина Е.А.	382		
Тюмкина Т.В.	292	Чорбу А.А.	319		
Ульянкин Е.Б.	293	Чугунова Е.А.	153		
Успенская А.А.	147	Чулаков Е.Н.	307		
Фаизова Р.Г.	148	Чусов Д.А.	71		
Файзуллин Р.Р.	294	Шабалин Д.А.	383		
Фараонов М.А.	295	Шаинова Р.С.	384		
Федин В.П.	18	Шаинян Б.А.	72		
Федоров Ю.В.	296	Шайдуллин Р.Р.	309		
Федорова О.А.	67	Шайхутдинова З.М.	310		
Федюшкин И.Л.	19	Шамбалова В.Э.	308		
Ферштат Л.Л.	68	Шацаускас А.Л.	311		
Феста А.А.	149	Шиабиев И.Э.	312		
Филатов В.Е.	297	Шинкарь Е.В.	385		
Филатова Е.А.	378	Шкинева Т.К.	386		
Филиппов И.Р.	298	Шкирдова А.О.	387		
Финк А.О.	299	Шмидт Е.Ю.	73		
Фисюк А.С.	69	Штейнгольц С.А.	313		
Фоминых О.И.	379	Шуваев А.Д.	314		
Хабибрахманова А.М.	150	Шувалов В.Ю.	315		
Хабибулина Л.Р.	300	Шуталев А.Д.	388		



- **ИМПОРТНЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКТИВЫ**
- **ОСОБО ЧИСТЫЕ ВЕЩЕСТВА**
- **РАСТВОРИТЕЛИ**
- **АНАЛИТИЧЕСКИЕ СТАНДАРТЫ**
- **РАСТВОРИТЕЛИ ДЛЯ ЯМР**
- **СО СКЛАДА В МОСКВЕ И ПОД ЗАКАЗ**



CAS: 75-05-8, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>N, MW: 41.05 g/mol, mp: -48 °C (lit.)  
 bp: 2.0 °C (lit.), fp: 2.0 °C closed cup, d: 0.786 g/mL at  
 20 °C (lit.), n<sub>D</sub>20 1.344 (lit.), vapor pressure: 72.8 mmHg  
 purity: >99.9% (GC)  
 form: liquid  
 solubility: water soluble (completely)  
 color: APHA 510

Store and store under inert gas. CHROMASOLV® is a  
 trademark of Specialty Chemicals Seelze GmbH. Safety data  
 sheet available. For R&D use only. Not for drug, household, or  
 food use.

UN1648

**MERCK**

**Sigma-Aldrich®**

Lab & Production Materials

**TH. GEYER**  
SUPPORTING YOUR TEAM

**DASITGROUP**

**CARLO ERBA**  
LABORATORIES

**Supelco®**  
Analytical Products

**SAFC®**  
Pharma & Biopharma Raw  
Material Solutions

**chemPUR**  
Our Partner for Chemie & Physik

**fluorochem**

**Alfa Aesar**

**abcr**

**AmBeed**

**CHEM  
IMPEX**

**Toronto Research Chemicals**  
products for innovative research



Все для Вашей лаборатории  
**ГАЛАХИМ**

+7 (495) 151-01-50

andresyuk@gmail.com

www.galachem.ru

# ВСЁ ДЛЯ ВАШЕЙ ЛАБОРАТОРИИ

Лабораторное Оборудование  
Препаративные Хроматографы  
Фотореакторы  
Лабораторное стекло  
Все для хроматографии  
Сорбенты и пластины для ТСХ  
Хроматографы для ВЭЖХ  
Системы очистки воды  
Электросинтез



Agilent Technologies



Waters





# Качественные D-растворители для ЯМР

со склада в Москве

от компании CIL  
(Cambridge Isotope Laboratories)

## Более 20 наименований!



# Решения для Эффективных Исследований



## Анализ реакции in situ

Непрерывные измерения дают важную информацию о кинетике, механизмах и путях реакций



## Автоматический отбор проб

Отбор наиболее репрезентативных образцов для анализа в автономном режиме



## Измерение количества и размеров частиц в потоке

Отслеживание образования и роста частиц открывает новые возможности в кристаллизации



## Реакционная калориметрия

Для изучения тепловых эффектов реакции



## Автоматические станции синтеза

Выполнение экспериментов в контролируемых условиях с постоянным сбором данных

**Непревзойденный контроль условий реакции и максимум информации из каждого проведенного синтеза**



На сегодняшний день компания Глювекс предлагает широкую линейку оборудования, материалов и аксессуаров для органического синтеза, выделения продуктов реакций и анализа полученных соединений

DWK Life Sciences  
Excellence in your hands



Стеклопосуда и оборудование от одного из лидеров рынка - компании DWK

Реакторы высокого давления  
(автоклавы) Top Industrie



Рабочие температуры до 900 °C и давления до 7000 бар позволяют решать большинство задач современной химии

Проточные реакторы для безопасного гидрирования и озонолиза ThalesNano



Давление до 300 бар, температура до 450°C. Нет необходимости применения баллонов с водородом

Химически-стойкие вакуумные насосы  
и ротационные испарители KNF



Лиофильные сушилки Zirbus.  
От лабораторных до промышленных



Мы предлагаем широкий ассортимент спектрального и хроматографического оборудования от компании Agilent



**Наши специалисты осуществляют полный комплекс услуг по подбору, поставке, вводу в эксплуатацию, гарантийному и постгарантийному обслуживанию оборудования.**

**Контактная информация:**

Сайт: [gluvexlab.com](http://gluvexlab.com)

Тел: +7 (499) 270-16-62

Отдел продаж: [sales@gluvex.com](mailto:sales@gluvex.com)

Сервисная служба: [support@gluvex.com](mailto:support@gluvex.com)



## Лабораторное оборудование немецкой компании IKA WERKE GmbH со склада в Москве

- Ротационные испарители
- Лабораторные реакторы
- Магнитные мешалки
- Верхнеприводные мешалки
- Шейкеры
- Термостаты
- Диспергаторы
- Мельницы



Мы осуществляем гарантийное и постгарантийное обслуживание.  
Гарантия на оборудование IKA - до 5 лет!



