
**TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY**



**ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

МАТЕРИАЛЫ

**XXIV Международной научно-практической
конференции студентов и молодых ученых**

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ ТОМ 1

ХХТ-2023

15 – 19 мая 2023 года, г. Томск

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА НОВЫХ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ШКОЛА ХИМИЧЕСКИХ И БИОМЕДИЦИНСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ

Материалы
XXIV Международной научно-практической конференции
студентов и молодых ученых
имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера,
посвященной 85-летию со дня рождения профессора А.В. Кравцова

15–19 мая 2023 г.

Том 1

Томск 2023

УДК 54+66(063)
ББК 24+35л0
Х46

Химия и химическая технология в XXI веке : материалы XXIV Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 85-летию со дня рождения профессора А.В. Кравцова. В 2 томах. Том 1 (г. Томск, 15–19 мая 2023 г.) / Томский политехнический университет. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2023. – 544 с.

ISBN 978-5-4387-1130-8 (т. 1)
ISBN 978-5-4387-1129-2

В сборнике представлены материалы XXIV Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке». В материалах конференции обсуждаются различные вопросы современной химической науки. Большое внимание уделено созданию новых материалов со специальными свойствами. Рассмотрены новые подходы к лабораторному и промышленному синтезу органических молекул, описывается вклад этих работ в фундаментальные закономерности формирования связи «углерод — углерод». Значительная часть работ посвящена изучению свойств твердых материалов биомедицинского и строительного назначений. Кроме того, приведен ряд работ молодых ученых, выполненных на английском языке. Большой интерес представляют работы школьников, посвященных вопросам защиты окружающей среды и применению бытовой химии.

Среди материалов сборника приведены работы Сибирского химического симпозиума, посвященные современному органическому синтезу, и работы научной школы «Переработка углеводородного сырья: катализаторы, технологии, цифровизация», посвященные моделированию процессов нефтегазовой отрасли.

УДК 54+66(063)
ББК 24+35л0

Оргкомитет
конференции:

634050, Томск, пр. Ленина, 43а, ТПУ, ауд. 136,
ОХИ ИШПР ТПУ
Тел. +7-913-809-91-17
e-mail: orgcomННТ@tpu.ru
hht.tpu.ru

ISBN 978-5-4387-1130-8 (т. 1)
ISBN 978-5-4387-1129-2

© ФГАОУ ВО НИ ТПУ, 2023

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРСПЕКТИВ ПРИМЕНЕНИЯ СУЛЬФОНАМИДНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ДИАРЕНТИАЗЕПИНОНОВ В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРОВ КАРБОАНГИДРАЗЫ ЧЕЛОВЕКА

Д. С. Смирнова

Научный руководитель – к.х.н., доцент А. В. Сапегин

Санкт-Петербургский Государственный Университет, Институт Химии
198504, Россия, Санкт-Петербург, г. Петергоф, Университетский пр. 26
smirnova-darya-s@yandex.ru

Преыдушие работы нашей научной группы показали, что первичная сульфонамидная группа в N-замещенных диареноксозеипинонах позволяет им проявлять ингибирующую активность в отношении различных изоформ человеческой карбоангидразы (СА) [1]. Было выдвинуто предположение, что данная активность сохранится при замене гетероатома кислорода в семичленном гетероциклическом фрагменте на атом серы. Таким образом, предметом нашего исследования стали N-замещенные диарентиазеипиноны, содержащие первичную сульфонамидную группу, и их ингибирующая активность.

Для получения целевых молекулярных систем нами был отработан синтетический путь, включающий несколько стадий (Схема 1). Прекурсорами в нем выступили тиосалициловая кислота **1** и 3-нитро-4-хлорбензолсульфонамид **2**, взаимодействие которых привело к получению 2-((2-нитро-4-сульфамилфенил)тио)бензойной кислоты **3**. В ходе проведения оптимизации условий осуществления данной стадии было показано, что полупродукт **3** может быть выделен с выходом 66 % при проведении реакции в течение 24 ч. в кипящей смеси растворителей *i*-PrOH-H₂O в присутствии в качестве основания K₂CO₃. Кроме хорошего выхода кислоты

3, данные условия осуществления реакции позволили получить продукт достаточной степени чистоты, чтобы не проводить дополнительных операций по его очистке.

Далее кислота **3** вводилась в реакцию амидирования с различными первичными аминами, приводя тем самым к 2-((2-нитро-4-сульфамилфенил)тио)бензамидам **4**. При оптимизации условий проведения данной стадии нами были испробованы несколько комбинаций реагентов, активирующих карбоксильную группу, при этом наилучший выход **4** был достигнут при использовании смеси EDCI+HOBT+DIEA и проведении синтеза в безводном ДМФА.

На третьей стадии разработанной схемы амиды **4** подвергались циклизации, протекающей через тандемную реакцию S_NAr, и приводящей к формированию 11-оксо-10,11-дигидродибензо[*b,f*][1,4]тиазеипин-7-сульфонамидов **5**. Наилучшие выходы трициклов **5** были достигнуты при проведении реакции в среде осушенного ДМФА при 80 °С в присутствии депротонирующего агента – Cs₂CO₃.

Кроме того, некоторые из гетероциклических систем **5** подверглись окислению, что позволило получить нам производные дибензо[*b,f*][1,4]тиазеипин-11(10*H*)-он 5,5-диоксида **6**.

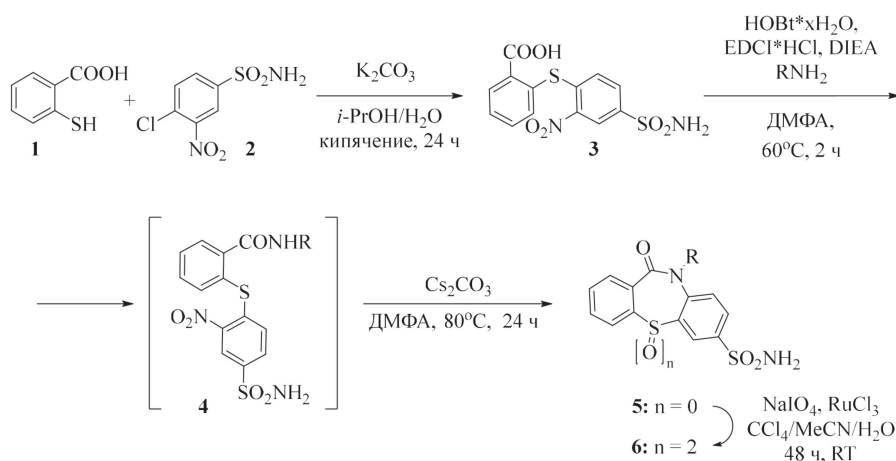


Схема 1. Общая стратегия синтеза тиазеипинонов и их окисленных аналогов

Все синтезированные соединения **5** и **6** были исследованы на предмет возможной ингибирующей ферментативной активности по отношению к карбоангидразе методом установления их эстеразной активности. Было установлено, что полученные молекулярные системы проявляют

ингибирующую активность СА, выраженную величиной IC_{50} от 0,15 до 0,59 мкмоль/л.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 22-23-00439.

Список литературы

1. *Sapegin A., Kalinin S., Angeli A., Supuran C. T., Krasavin M. // Bioorganic Chemistry, 2018. – Vol. 76. – P. 140–146.*

СИНТЕЗ НОВЫХ NO-ДОНОРНЫХ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ ОРИЕНТИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ АНСАМБЛЕЙ ФУРОКСАНОВОГО РЯДА

И. А. Стеблецова

Научные руководители – к.х.н., с.н.с. А. А. Ларин; д.х.н., в.н.с. Л. Л. Ферштат

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, ВХК РАН

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9, irinasteb1@icloud.com

Применяемые в клинической практике противоопухолевые препараты отличаются низкой селективностью, высокой агрессивностью и аллергенностью. Так актуальным направлением современной медицинской химии является синтез новых терапевтических агентов, избирательно действующих на нужные биологические мишени. 1,2,5-Оксадиазол 2-оксиды (фуроксаны) – экзогенные доноры оксида азота (II) (NO), обладающие антипролиферативным действием и способные селективно ингибировать развитие некоторых клеточных линий рака человека. **Целью** представленной работы является разработка методов конструирования новых

фармакологически ориентированных производных фуроксана, содержащих дополнительные фармакофорные гетероциклические фрагменты (1,2,3-триазол, 1,2,4-оксадиазол) и оценка их NO-донорной способности.

Нашей исследовательской группой был разработан эффективный одnoreакторный подход к синтезу 3,4-бис- и 4-(1,2,4-оксадиазол-3-ил)-3-цианофуроксанов из бис- и моноамидоксимов **1** и **2**. В результате получена серия из 18 новых соединений **3a-i** и **4a-i**.

Для всех синтезированных производных (1,2,4-оксадиазол-3-ил)фуроксанов **3a-i**, **4a-i** была исследована NO-донорная способность.

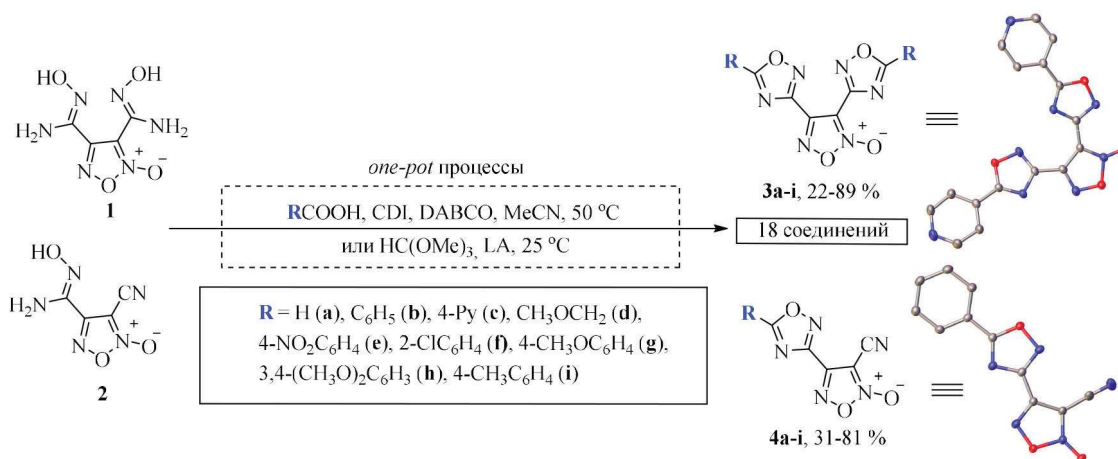


Схема 1. Методы получения (1,2,4-оксадиазол-3-ил)фуроксанов