



KOST

ВСЕРОССИЙСКИЙ КОНГРЕСС по химии гетероциклических соединений



СБОРНИК ТЕЗИСОВ

с 15 по 19 сентября 2025

г. Владикавказ, Северная Осетия

kostcongress.ru

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

*Всероссийского конгресса по химии
гетероциклических соединений*

KOST-2025

г. Владикавказ, Северная Осетия
15-19 сентября 2025 года

kostcongress.ru

ГЕНЕРАЛЬНЫЙ СПОНСОР



АКСЕЛЬФАРМ

СПОНСОРЫ



ЭЛЕМЕНТ

СОВ  **ЛАБ**
КОМПЛЕКСНОЕ ОСНАЩЕНИЕ

ПРИ ТЕХНИЧЕСКОЙ ПОДДЕРЖКЕ



ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЙ ОПЕРАТОР КОНГРЕССОВ
WWW.MESOL.RU

Содержание

ПЛЕНАРНЫЕ ЛЕКЦИИ	5
ПРИГЛАШЕННЫЕ ДОКЛАДЫ	9
УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ	53
СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ	167
ЗАОЧНОЕ УЧАСТИЕ	217



ПЛЕНАРНЫЕ ЛЕКЦИИ

**ПЕРОКСИЛЬНЫЕ, N-ОКСИЛЬНЫЕ, АЛКИЛЬНЫЕ И СУЛЬФОНИЛЬНЫЕ РАДИКАЛЫ В
РЕАКЦИЯХ ОКИСЛИТЕЛЬНОГО СОЧЕТАНИЯ**

Терентьев А.О.

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Р

Р-ГЕТЕРОЦИКЛЫ С ЭНДОЦИКЛИЧЕСКИМИ ТРИАДАМИ $P^{III}-O-C(sp^2)$ И $P^V-O-C(sp^2)$ В РЕАКЦИЯХ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

Миронов В.Ф.^а, Немтарев А.В.^а, Димухаметов М.Н.^а, Ивкова Г.А.^б

^аИнститут органической и физической химии им. А.Е.Арбузова

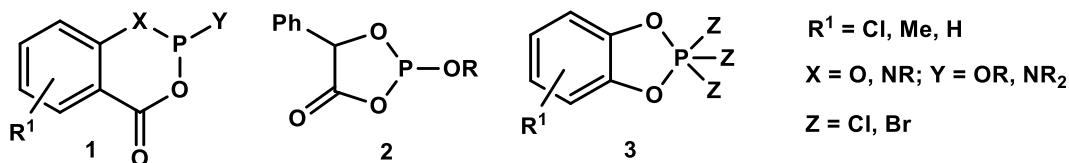
ФИЦ Казанский научный центр РАН

^бКазанский (Приволжский) федеральный университет

Реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения – хорошо разработанный и широко используемый мощный синтетический метод синтеза большого круга разнообразных гетероциклических систем [1]. 1,3-Диполярные реагенты, являющиеся одним из типов секстенов [2], легко вступают в реакции [3+2]-циклоприсоединения с диполярофилами, [3+3]-димеризации (типа «голова к хвосту» или «голова к голове»), [1+1]-димеризации, тримеризации, полимеризации, а также в различные перегруппировки.

Гетероциклические системы, содержащие эндоциклические триады $P^{III}-O-C(sp^2)$ и $P^V-O-C(sp^2)$ по топологии формально напоминают 1,3-диполи $[P^{\delta-}-O-C^{\delta+}]$ и $[P^{\delta+}-O-C^{\delta-}]$ и способны также вступать в реакции [3+2]-циклоприсоединения с карбонильными соединениями, имидами и терминальными ацетиленами, результатом которых является расширение пяти- или шестичленного Р-гетероцикла до шести- или семичленных структур. По механизму этот процесс отличается от реакций расширения цикла в ряду углерод-, азот- или Р(IV)-фосфорсодержащих гетероциклов [3-7]. Для фосфацикланов процесс также включает термодинамически выгодное образование фосфорильной группы, т.е. переход трех- или пятикоординированного фосфора в четырехкоординированное состояние. Кроме того, учитывая «бифильность» атома фосфора(III) (наличие неподеленной электронной пары и вакантных *d*-орбиталей), т.е. его топологическое сходство с этиленовой связью, возможна реализация и процессов [1+4]-циклоприсоединения.

В докладе обобщены и проанализированы работы авторов за последние годы по синтезу гетероциклических производных как четырех-, так и пятикоординированного атома фосфора на основе реакций производных Р(III,V) с соединениями, содержащими активированные кратные связи (карбонильные соединения, имины, алкены, алкины), которые по топологии можно формально отнести к реакциям циклоприсоединения как в межмолекулярном так и внутримолекулярном (каскадном) варианте. В качестве Р-гетероциклов рассмотрены циклические производные гидроксикарбоновых кислот (таких как салициловая, миндальная и др.), а также Р,Р,Р-тригалогенбензофосфолы (1-3). Вместо фосфолов (3) рассмотрен также вариант каскадной трехкомпонентной реакции хлорид (бромид) фосфора(III) – орто-хинон – терминальный алкин.



Цитируемая литература

1. M.Breugst and H.-U.Reissig. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 12293–12307.
2. B.I.Buzykin. *Rev. J. Chem.* 2013, 3, 207–238.
3. K.Lu, P.-P.Zhou, Y.-Q.Tu, et al. *Nat. Commun.* 2025. Doi 10.1038/s41467-025-57859-7.
4. J.M.Wootton, J.K.F.Tam, W.P.Unsworth. *Chem. Commun.* 2024, 60, 4999–5009.
5. B.Biletskyi, P.Colonna, K.Masson, et al. *Chem. Soc. Rev.* 2021, 50, 7513–7538.
6. R.Li, B.Li, H.Zhang, et al. *Nature Chem.* 2021, 13, 1006–1016.
7. A.S.Nenashev, D.A.Dospekhov, M.V.Zavaruev, et al. *J. Org. Chem.* 2024, 89, 6533–6538.

ЭФФЕКТИВНЫЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ И ЛЮМИНОФОРЫ
НА ОСНОВЕ СЕРУСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОАРОМАТИЧЕСКИХ ФРАГМЕНТОВ**Пономаренко С.А.^{а,б}, Боршев О.В.^а, Лупоносов Ю.Н.^а**^а*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С.Ениколопова
Российской академии наук, Москва, Россия*^б*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.
e-mail: ponomarenko@ispm.ru*

Разнообразные серусодержащие гетероароматические фрагменты широко используются в синтезе сопряженных органических молекул (рис. 1). На основе тиофена получают линейно-сопряженные, аннелированные и разветвленные молекулы, применяемые в органической электронике, оптоэлектронике и фотонике [1]. Олиготиофены известны как эффективные органические полупроводники для органических полевых транзисторов, в то время как тиофен-фениленовые соолигомеры обладают высокой люминесценцией в пленках, тип основных носителей зарядов и подвижность которых может регулироваться химической природой концевых заместителей, что позволяет изготавливать из них органические светоизлучающие транзисторы [2-4]. Наибольшую подвижность носителей зарядов проявляют аннелированные структуры, к которым относятся различные производные [1]бензотиено[3,2-*b*]бензотиофена (ВТБТ) [5-8]. Аннелированные тиенотиофеновые и тиенопиррольные фрагменты входят в структуру различных нефуллереновых акцепторов, используемых в эффективных органических фотовольтаических устройствах [9,10]. 2,1,3-бензотиадиазол является другим востребованным серусодержащим гетероароматическим фрагментом, к особенностям которого относятся его высокая акцепторная способность и стабильность. Он был успешно использован для синтеза ряда эффективных линейных и разветвленных органических люминофоров различного назначения [11-14].

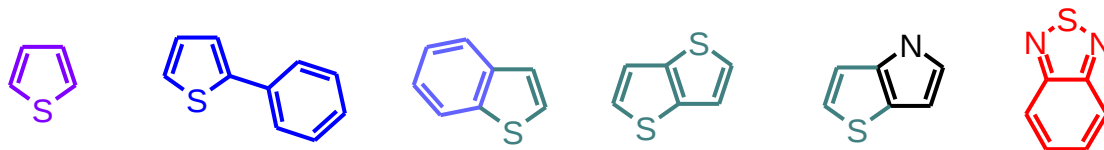


Рис. 1. Серусодержащие гетероароматические фрагменты, рассматриваемые в докладе.

Литература

1. В.Н. Чарушин, Е.В. Вербицкий, О.Н. Чупахин и др. *Успехи химии*, 2024, **93**, RCR5125.
2. A.Yu. Sosorev, M.V. Vener, O.G. Kharlanov at al. *J. Phys. Chem. C*, 2023, **127**, 17948.
3. D.R. Maslennikov, D.I. Dominskiy, A.Yu. Sosorev at al. *J. Phys. Chem. C*, 2024, **128**, 9364.
4. V.A. Trukhanov, A.Yu. Sosorev, D.I. Dominskiy at al. *Molecules*, 2024, **29**, 2533.
5. I.O. Gudkova, E.A. Sorokina, E.A. Zaborin at al. *Rus. J. Org. Chem.*, 2024, **60**, 1074.
6. R.S. Fedorenko, L.A. Poletavkina at al. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2025, **27**, 12119.
7. A.Yu. Sosorev, V.A. Trukhanov, M.S. Skorotetcky at al. *J. Phys. Chem. C*, 2025, **129**, 23, 10652.
8. L.L. Levkov, N.M. Surin, O.V. Borshchev at al. *Materials*, 2025, **18**, 743.
9. I.V. Dyadishchev, A.V. Bakirov, S.M. Peregudova at al. *Mendeleev Commun.*, 2023, **33**, 393.
10. E.D. Papkovaksya, J. Wan, D.O. Balakirev at al. *Energies*, 2023, **16**, 3443.
11. V.A. Postnikov, N.I. Sorokina, A.A. Kulishov at al. *ACS Omega*, 2024, **9**, 14932.
12. V.A. Postnikov, N.I. Sorokina, G.A. Yurasik at al. *Optical Materials*, 2025, **160**, 116764.
13. I.V. Dyadishchev D.O. Balakirev, N.K. Kalinichenko at al. *Dyes Pigm.*, 2024, **224**, 112003.
14. L.L. Levkov, O.V. Borshchev, S.A. Pisarev at al. *Mendeleev Commun.* 2024, **34**, 170.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (Грант 19-73-30028).



ПРИГЛАШЕННЫЕ ДОКЛАДЫ

РАСКРЫТИЕ ФУРАНОВОГО ЦИКЛА КАК МЕТОДОЛОГИЯ СИНТЕЗА ТЕТРАЦИКЛИЧЕСКИХ ХИНОКСАЛИНОВ

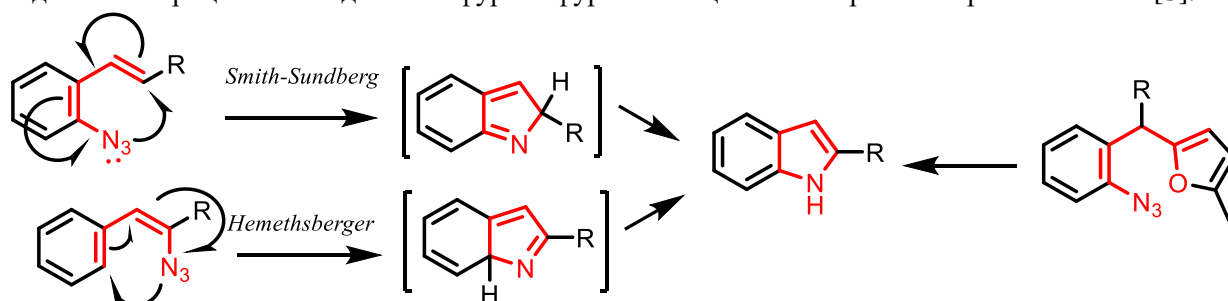
Абаев В.Т.^{а,б}, Арутюнянц А.А.^а, Егоров Д.И.^а

^аСеверо-Осетинский государственный университет,
ул. Ватутина 43-46, Владикавказ, 362025, Россия.

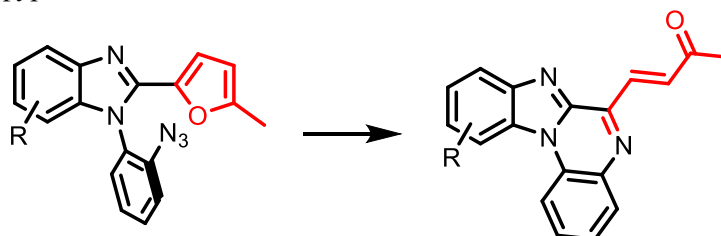
e-mail: hampazero@mail.ru

^бСеверо-Кавказский федеральный университет,
ул. Пушкина 1а, Ставрополь, 355009, Россия

Винил- и арилазиды широко используются в синтезе гетероциклических соединений. В частности, классическими методами синтеза пирролов, индолов и карбазолов являются реакция Смита-Сандберга [1] с участием арилазидов и синтез Хеметсбергера исходящий из стирилазидов [2]. Ключевой стадией этих СН-аминирований является электроциклизация диенилазидного фрагмента с последующим 1,5-сдвигом атома водорода. Раскрытие фуранового цикла под действием азидной функции было описано нами ранее на примере синтеза халконов индольного ряда. Интересно, что реакция не является электроциклической так-как в исходном для этого процесса 2-азидобензилфуране фурановый цикл не сопряжён с ароматическим [3].



Это наблюдение позволило предположить, что для взаимодействия фуранового цикла с азидной функцией или с генерируемым из нее нитреном достаточно благоприятного пространственного расположения. Действительно, в случае термоллиза N-2-азидоарил-2-фурилбензимидазолов была получена серия бензо[4,5]имидазо[1,2-а]хиноксалинов, что является первым примером построения хиноксалинового цикла с использованием раскрытия фурана.



Литература

1. Sundberg R. J., Russell F.H., Woodvin V. L., Long-Su Lin. *J. Organic Chem.* 1972 **37** (5), 719-724.
2. Hemetsberger, H., Knittel, D., Weidmann, H., *Monatshefte für Chemie*, 1969. **100**(5), 1599-1603.
3. Abaev V. T., Plieva A. T., Chalikidi P. N., Uchuskin M. G.G., Trushkov I. V., Butin A. V. *Org. Lett.* 2014, **16**, 4150–4153.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00446).

НАНОЧАСТИЦЫ МЕДИ В РЕАКЦИЯХ АМИНИРОВАНИЯ И ТИОЛИРОВАНИЯ

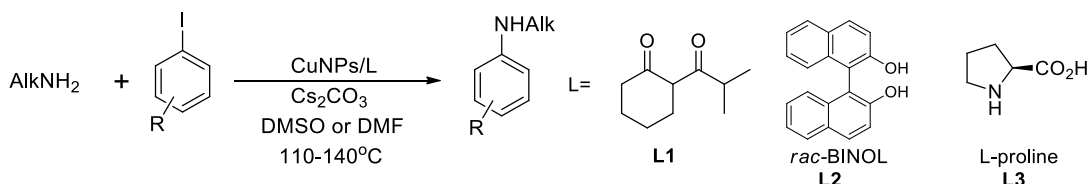
**Аверин А.Д.^{а,б}, Мурашкина А.В.^а, Фоменко В.И.^а, Малышева А.С.^{а,в},
Лексаков Д.А.^а, Белецкая И.П.^{а,б}**

^аМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.

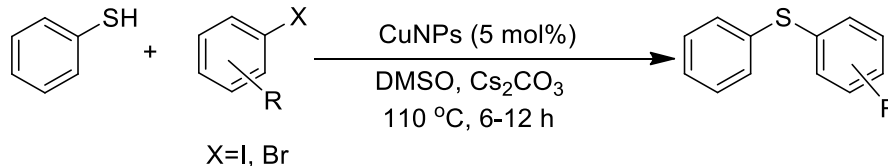
^бИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

^вDepartment of Chemistry, Shenzhen MSU-BIT University, Shenzhen, China
e-mail: alexaveron@yandex.ru

Продemonстрировано успешное использование неиммобилизованных наночастиц меди (CuNPs) в качестве катализаторов образования связи углерод-азот в присутствии таких лигандов, как 2-изобутирилциклогексанон и *rac*-БИНОЛ; оптимизированы условия реакций аминирования арил- и гетероарилгалогенидов алифатическими аминами и NH-гетероциклами, при этом целевые соединения получены с выходами более 90%. CuNPs 25 нм и 10/80 нм продемонстрировали наилучшую каталитическую активность, добавка 1 экв. NaI позволяет успешно проводить реакции аминирования также и с бромаренами, также как и использование 2 экв. бромарена при увеличении времени реакции.



Показана возможность образования диарилсульфидов, в том числе несимметричных, реакциями тиолирования арилгалогенидов с использованием тиофенола, дифенилдисульфида и тиомочевины в присутствии наночастиц меди, данный процесс успешно осуществлен без добавления лигандов, при этом достигнуты практически количественные выходы целевых соединений практически вне зависимости от природы используемых наночастиц меди.



Исследования вымывания меди в раствор, в том числе, в ходе реакций и исследования ее каталитической активности показывают сильную зависимость данного процесса от природы катализатора и условий, а также свидетельствуют в пользу того, что наноразмерные катализаторы служат резервуаром активных частиц, которые катализируют значительную часть реакции. Эксперименты по рециклизации наноразмерных катализаторов показали, что в присутствии катализатора CuNPs 25 нм образование *n*-октиланилина без значительного падения выхода возможно на протяжении 9 циклов, а в реакции тиомочевины с иодбензолом в присутствии CuNPs 10/80 нм образование дифенилсульфида происходит без заметного уменьшения выхода в течение 6 циклов. Методами электронной микроскопии (ПЭМ и СЭМ) в сочетании с электронографией и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопией показано, что независимо от начальной степени окисления меди в катализаторе после реакции происходит ее окисление до CuO, при этом изменения размера и морфологии частиц на первом и последующем циклах сильно различаются; также исследованы трансформации нанокатализатора в ходе реакции на разной глубине протекания процесса.

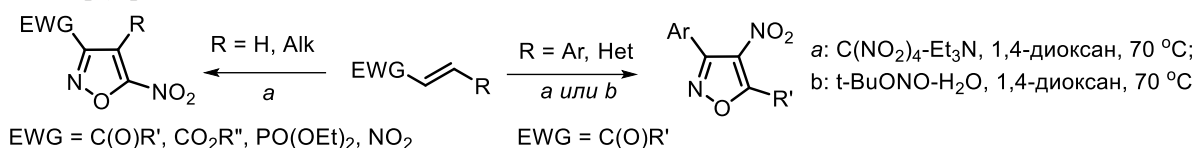
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00149).

НОВЫЕ МЕТОДЫ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ ИЗОКСАЗОЛЬНОГО ЦИКЛА И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ В СИНТЕЗЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

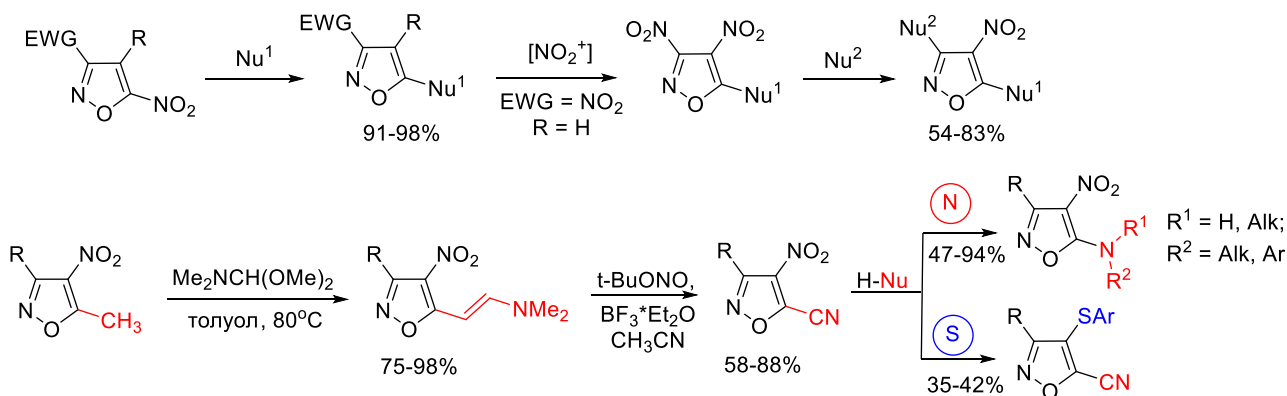
Аверина Е.Б., Василенко Д.А., Астахова Н.Е., Сазонов А.С., Дронов С.Э.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.
e-mail: elaver070766@yandex.ru

Изоксазольный цикл является одним из наиболее популярных фрагментов в дизайне биологически активных соединений и новых материалов, поэтому разработка простых и эффективных методов синтеза функционализированных изоксазолов является важной задачей органической и медицинской химии. Недавно в нашей научной группе были разработаны новые хемо- и региоселективные методы синтеза 4- и 5-нитроизоксазолов на основе реакции гетероциклизации электрофильных алкенов под действием комплекса $C(NO_2)_4-Et_3N$ [1,2].



Предложен метод дальнейшей функционализации изоксазольного цикла на основе S_NAr реакций 3- EWG-5-нитроизоксазолов с различными O-, N-, S-нуклеофилами и последующих превращений образующихся продуктов. Также на основе 5-метил-4-нитроизоксазолов был разработан новый двухстадийный метод синтеза ранее неизвестных 4-нитро-5-цианоизоксазолов, которые в условиях S_NAr реакции в зависимости от природы нуклеофила дают продукты замещения нитро- или цианогруппы. Обсуждаются некоторые аспекты механизмов изученных реакций.



Разработанные методы синтеза и функционализации производных изоксазола позволили получить из доступных реагентов гетероциклы, содержащие широкий спектр заместителей и функциональных групп, а также осуществить направленный синтез соединений с противораковой или антимикробной активностью.

Литература

1. Y. A. Volkova, E. B. Averina, D. A. Vasilenko, K. N. Sedenkova, Y. K. Grishin, P. Bruheim, T. S. Kuznetsova, N. S. Zefirov *J. Org. Chem.*, **2019**, 84, 3192.
2. D. A. Vasilenko, K. S. Sadovnikov, K. N. Sedenkova, A. V. Kurova, Y. K. Grishin, T. S. Kuznetsova, V. B. Rybakov, Y. A. Volkova, E. B. Averina *Synthesis*, **2020**, 52, 1398.

СИНТЕЗЫ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОФИЛЬНОЙ
АКТИВЦИИ АЛКЕНОВ

Аксенов А.В., Арутюнов Н.А., Аксенова А.А., Аксенов Д.А.

*Северо-Кавказский федеральный университет,
химический факультет, Ставрополь, Россия.
e-mail: aaksenov@ncfu.ru*

Разработаны методы синтеза и функционализации широкого спектра органических соединений, включая гетероциклические, краун-эфиры, которые могут быть весьма интересны для получения различных хелатов и других интересных соединений. Исследована биологическая активность синтезированных веществ.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-73-20003,
<https://rscf.ru/project/25-73-20003/>*

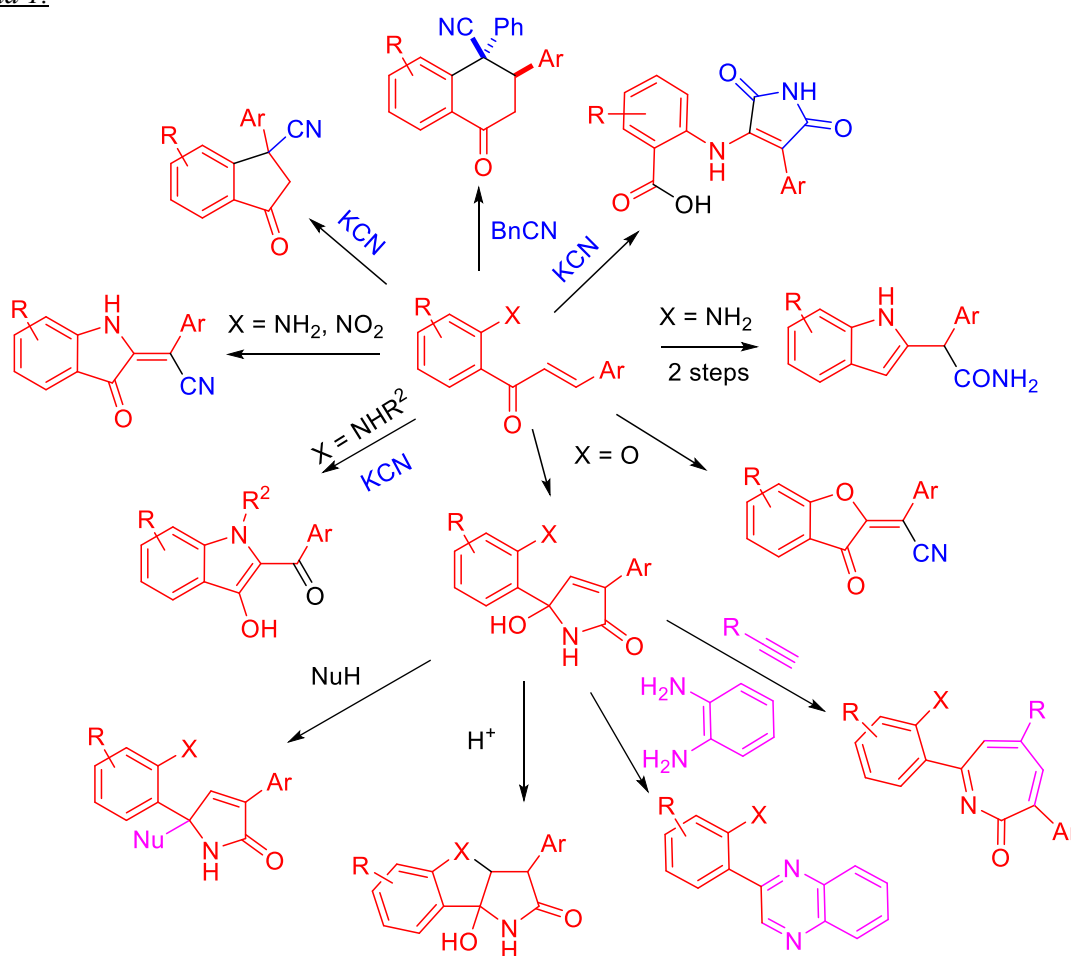
ПОСЛЕДНИЕ ДОСТИЖЕНИЯ В ХИМИИ 3-ЦИАНОКЕТОНОВ И ПЕРСПЕКТИВЫ ДАЛЬНЕЙШЕГО РАЗВИТИЯ НАПРАВЛЕНИЯ

Аксенов Н.А., Аксенов А.В., Аксенов Д.А.

Северо-Кавказский федеральный университет, 355017, г. Ставрополь, ул. Пушкина, 1, 355017, Российская Федерация; e-mail: radioanimation@rambler.ru

Последние 5 лет основным направлением развития кафедры выступала химия 4-кетонитрилов – соединений, сочетающих в себе 2 реакционноспособных группы – кето и нитрильную, что позволило использовать их как основу для широкого круга каскадных превращений, приводящих к образованию важных гетероциклических систем, часто встречающихся в различных биологически активных соединениях, а также, достаточно редкие аналоги природных соединений – азотропы, ранее описанные в литературе лишь в виде бензконденсированных аналогов. В докладе будут собраны основные достижения в данной области и возможные дальнейшие точки роста. (Схема 1).

Схема 1.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-10027, <https://rscf.ru/project/24-73-10027/>.

ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ТРИАРИЛМЕТИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ И ПРИМЕНЕНИЕ ИХ ^{13}C ИЗОПОЛОГОВ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ pH В РАКОВЫХ КЛЕТКАХ ЧЕЛОВЕКА

**Багрянская Е.Г., Райзвих А.Е., Овчеренко С.С., Чинак О.А., Трухин Д.Т.,
Рогожникова О.А., Тормышев В.М.**

*Институт органической химии им. А.Н. Воровцова СО РАН,
пр. Академика Лаврентьева, 9, г. Новосибирск, 630090, Российская Федерация
Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, 2, г. Новосибирск, 630090, Российская Федерация
e-mail: egbagryanskaya@nioch.nsc.ru*

За последние два десятилетия триарилметильные радикалы (ТАМ, тритилы) стали универсальными спиновыми зондами для биофизических исследований *in vitro* и *in vivo*, а также для биомедицинской диагностики. Синтез спиновых меток и зондов на основе ТАМ претерпел значительные успехи, и присущие ТАМ свойства, такие как гидрофильность, низкая токсичность и узкий сигнал электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) с длительными временами релаксации электронного спина [1]. Недавние исследования показали, что окислительно-восстановительные реакции с участием радикала ОХ063 могут эффективно протекать в культуральных средах с высоким избытком тиолов, приводя к последовательному превращению ОХ063 в соответствующий ему диамагнитный QM и последующему преобразованию в ОХ063-ОН, структурно модифицированный ТАМ с pH-чувствительными свойствами [2]. Образование ОХ063-ОН из QM в богатых тиолами средах и само преобразование также наблюдалось в присутствии сильных восстановителей.

Окислительно-восстановительные превращения триарилметильного радикала ОХ063, обогащенного ^{13}C , были исследованы в раковых клетках человека [3]. Конъюгация ОХ063 с проникающим в клетки пептидом RL2 позволила детектировать превращений ОХ063 в аэробных условиях в раковых клетках MDA-MB-231 и A549. В обеих клеточных линиях наблюдалось окисление ОХ063 до хинонметида (QM), опосредованное активными формами кислорода. Последующее восстановление QM тиолами давало pH-чувствительный радикал ОХ063-ОН. Анализ спектров электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) выявил средний внутриклеточный диапазон pH 5,64–5,86 и 45,6% превращение QM в ОХ063-ОН. Образование радикалов ОХ063-ОН было обнаружено как для ОХ063, так и для QM, что указывает на возможность количественной оценки окислительно-восстановительного статуса клеток с помощью радикалов ТАМ-ОН. Эти результаты подтверждают эффективность ^{13}C -ОХ063-ОН в качестве зонда для мониторинга pH опухолей, что может улучшить персонализированные диагностические и терапевтические подходы.

Литература

1. V. M. Tormyshev,; E. G. Bagryanskaya, *Russian Chemical Bulletin* 2021, **70** (12), 2278–2297
2. S. S. Ovcherenko,; A. E. Raizvich,; Rogozhnikova, O. Y.; Tormyshev, V. M.; Trukhin, D. V.; Koval, V. V.; Salnikov, G. E.; Genaev, A. M.; Shernyukov, A. V.; Bagryanskaya, E. G.. *Chemistry–A European Journal* **2024**, *30* (52), e202400718.
3. A. Raizvikh, S. Ovcherenko, O. Chinak, D. Trukhin, O. Rogozhnikova, V. Tormyshev, V. Koval, E. Bagryanskaya, *JACS*, 2025, submitted.

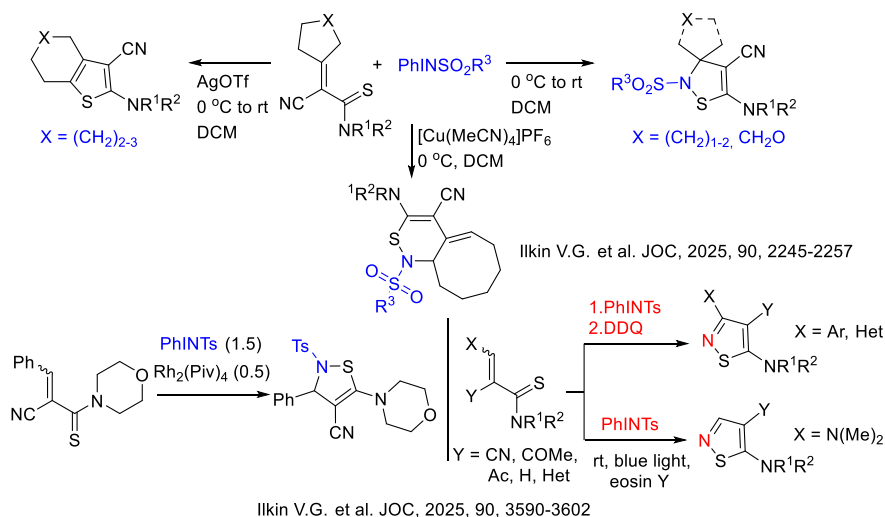
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 00-00-00001).

ИМИНОЙДОИНАНЫ В СИНТЕЗЕ ПЯТИЧЛЕННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Березкина Т.В., Илькин В.Г., Бакулев В.А.

Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия
e-mail: v.a.bakulev@urfu.ru

Соединения гипервалентного йода (III) находят широкое применение в современной органической химии в качестве экологически чистых эффективных реагентов. Реагенты с высоким содержанием йода обычно используются для галогенирования, окисления, аминирования, гетероциклизации и различных окислительных модификаций органических соединений. Йодониевые соли являются важными арилирующими реагентами, в то время как йодониевые илиды и имида являются предшественниками карбенов и нитренов. Различные производные бензойодоксолов, такие как азидобензойодоксолов, трифторметилбензойодоксолов, алкилбензойодоксолов и алкилбензойодоксолов нашли широкое применение в качестве реагентов для переноса групп в присутствии металлических катализаторов [1,2]. Описано использование йодониевых солей в синтезе гетероциклов из веществ, содержащих две экзоциклические двойные связи [3].



Литература

1. A. Yoshimura, V. Zdankin *Chem. Rev.*, 2024, **124**, 11108.
2. Yusubov, V. Zdankin *Mendeleev Commun.*, 2021, **31**, 282.
3. S. Hajra, A. Biswas *Org. Lett.*, 2020, **22**, 4990.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00395).

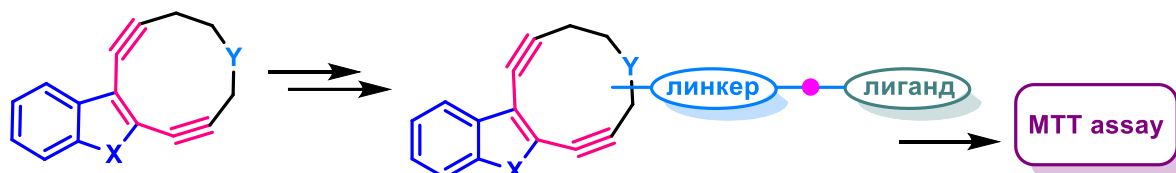
ГЕТЕРОЕНДИИНЫ – СКАФФОЛДЫ ДЛЯ СОЗДАНИЯ НОВЫХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ ПРЕПАРАТОВ

Балова И.А., Данилкина Н.А.

Санкт-Петербургский государственный университет,
институт химии, Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: i.balova@spbu.ru

Нами разработан синтетический подход и получен ряд гетероендиенов, конденсированных с гетероциклами, а также содержащих кислород, азот и серу в 10-членных циклах - гетероциклических аналогов природных эндиенов – мощных цитостатиков с ДНК-повреждающим действием [1–6].

Для получения конъюгатов гетероендиенов с опухоль-направленными лигандами нами также были изучены методы получения 10-членных О-, N-ендиенов, функционализированных по 10-членному кольцу для введения «кликабельных» функциональных групп [7]. В докладе будут обсуждаться выбор оптимальной эндиеновой структуры и оценка синтетической доступности выбранных эндиенов, а также определение факторов, влияющих на стабильность и активность молекулы, оценка связывания полученных эндиеновых систем с ДНК расчетными и экспериментальными методами, разработка методов эффективной функционализации и синтез гибридов эндиенов с увеличенной избирательностью действия на опухолевые клетки.



Литература

1. Danilkina N.A., Kulyashova A.E., Khlebnikov A.F.; Bräse, S., Balova, I.A. *J. Org. Chem.*, **2014**, 79 (19) 9018.
2. Lyapunova A.G., Danilkina N. A., Khlebnikov A. F., Köberle B., Bräse S., Balova I. A. *Eur. J. Org. Chem.*, **2016**, 28, 4842.
3. 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.
4. Govdi A.I., Danilkina N.A., Ponomarev A.V., Balova I.A. *J. Org. Chem.*, **2019**, 84, 1925.
5. Danilkina N.A., D'yachenko A.S., Govdi A.I., Khlebnikov A.F., Korniyakov I., Bräse S., Balova, I.A. *J. Org. Chem.*, **2020**, 85, 9001.
6. Danilkina N.A., Khmelevskaya E.A., Shtyrov A.A., Ryazantsev M.N., Khlebnikov A. F, Tupikina E.Yu., Rumyantsev A.M, D'yachenko A. S., Balova I.A. *Eur. J. Org. Chem.* **2024**, 27, e202401127
7. Danilkina N.A., Khmelevskaya E.A., Lyapunova A.G., D'yachenko A.S., Bunev A.S., Gasanov R.E., Gureev M.A., Balova I.A. *Molecules*, **2022**, 27, 6071.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-73-20075).

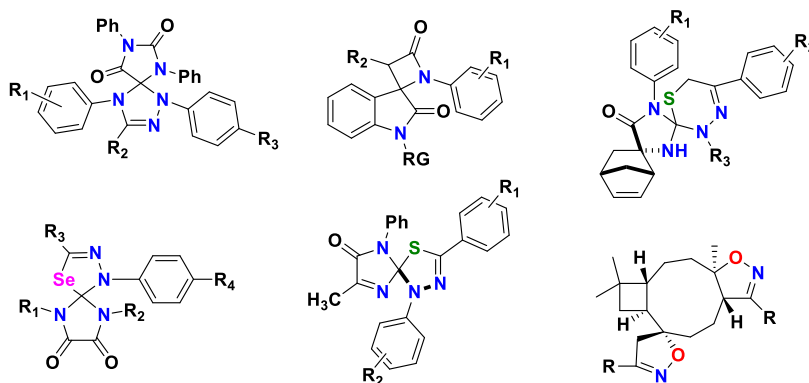
МЕТОДОЛОГИЯ ДИФфуЗИОННОГО СМЕШИВАНИЯ В СИНТЕЗЕ
СПИРОСОЧЛЕНЁННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Белоглазкина Е.К., Кукушкин М.Е., Шибанов Д.Е.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
119991, г. Москва, Ленинские горы, д.1, стр. 3;
e-mail: beloglazki@mail.ru

Спиросо́членённые гетероциклы представляют собой важный класс биологически активных соединений ввиду их конформационной жесткости и возможности регулировать связывание с биологическими мишенями путем оптимального подбора экзоциклических заместителей. Удобным способом синтеза таких гетероциклов являются реакции [3+2]- и [4+2]-циклоприсоединения 1,3-диполей и гетеродиенов по экзоциклическим кратным связям соединений-предшественников. При этом, если реакции циклоприсоединения по связям C=C и C=S достаточно подробно изучены, аналогичные реакции по связям C=N и C=Se, как и присоединение по реактивированным C=C связям, остаются значительно менее исследованной областью. Проблемы при проведении реакций циклоприсоединения могут быть связаны с нестабильностью промежуточных 1,3-диполей и гетеродиенов и их склонностью к димеризации и нежелательным побочным превращениям.

Решением этой проблемы может быть использование для генерации нестабильных интермедиатов метода диффузионного смешивания, позволяющего генерировать эти интермедиаты из устойчивых прешщественников под действием паров летучего основания. В докладе будут представлены данные по использованию метода диффузионного смешивания в синтезе различных N-, O-, S- и Se-содержащих спирогетероциклов и его сравнению с классическими синтетическими методиками. Описано хемо-, регио- и диастереоселективное получение ранее не описанных в литературе спиропроизводных, содержащих четырех-, пяти- и шестичленные азотсодержащие гетероциклы. Некоторые структурные типы синтезированных соединений показаны ниже.



Литература

1. Shybanov D.E., Kukushkin M.E., Beloglazkina E.K., et al. *New J. Chem.*, 2022, **46**, 18575.
2. Shybanov D.E., Kukushkin M.E., Beloglazkina E.K., et al. *Beilstein J. Org. Chem.*, 2025, **21**, 33581987.
3. Шибанов Д.Е., Белоглазкина Е.К., и др. *Изв. АН, Сер. хим.*, 2024, **73**, 3638.
4. Shybanov D.E., Kukushkin M.E., Beloglazkina E.K., et al. *IJMS*, 2024, **25**, 11435.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-13-00004).

ПРОИЗВОДНЫЕ НОРБОРНЕНА С АЗОТ- И КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИМИ ГРУППАМИ В НАПРАВЛЕННОМ ДИЗАЙНЕ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МЕМБРАННЫХ ПРОЦЕССОВ

Хрычкова А.П.^а, Бермешева Е.В.^а, Возняк А.И.^а,
 Андреев Ф.А.^а, Борисов И.Л.^а, Бермешев М.В.^{а,б}

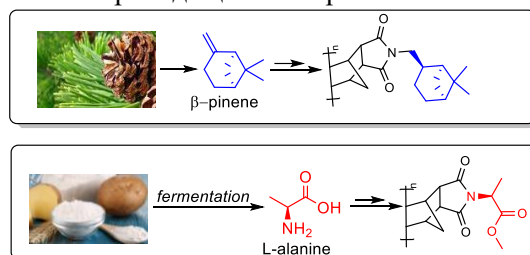
^аИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия.

^бИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва.

e-mail: bmv@ips.ac.ru

Молекулярный дизайн замещённых норборненов с полярными функциональными группами открывает широкие возможности для тонкой «настройки» химической природы боковых заместителей и архитектуры полимеров, получаемых на их основе. Это, в свою очередь, позволяет целенаправленно регулировать свойства материалов, включая их проницаемость, селективность, проводимость и устойчивость. Замещённые норборнены активно применяются при создании мембран нового поколения, востребованных в таких областях, как газоразделение, очистка воздуха и воды, топливные элементы и другие [1-3]. Особый интерес представляют производные норборнена, содержащие функциональные группы с атомами азота и кислорода, поскольку они формируют перспективную платформу для синтеза полимеров с заданными мембранными характеристиками – высокой селективной газопроницаемостью, ионной проводимостью, а также высокой химической и термической стабильностью [2-4].

Одной из ключевых задач при создании подобных материалов является поиск эффективных и селективных методов введения функциональных групп в бициклический остов норборнена. При этом важно, чтобы введённые группы не оказывали негативного влияния на процессы полимеризации и не взаимодействовали с используемыми катализаторами. В докладе рассматриваются современные достижения в области направленного синтеза функционализированных норборненов, содержащих азот- и кислородсодержащие группы (включая имидные, оксиановые, карбонатные и другие фрагменты), и их применение в качестве ключевых строительных блоков для создания высокоэффективных материалов, применяемых в газоразделительных технологиях и анионпроводящих мембранах.



Литература

1. H. Zhang, X. Wang, Y. Wang, Y. Zhang, W. Zhang, W. You *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, 62, e202217742.
2. N. Chen, Y. Jin, H. Liu, C. Hu, B. Wu, S. Xu, H. Li, J. Fan, Y.M. Lee *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 60, 19272.
3. A.P. Khrychikova, E.I. Medentseva, E.V. Bermesheva, I.L. Borisov, A.I. Wozniak, P.P. Lezhnin, K.S. Sadovnikov, X.-K. Ren, M.M. Il'in, V.P. Shantarovich, M.V. Bermeshev *Sep. Purif. Technol.*, 2025, 376, 133997.
4. I.V. Nazarov, A.P. Khrychikova, E.I. Medentseva, E.V. Bermesheva, I.L. Borisov, A.A. Yushkin, A.V. Volkov, A.I. Wozniak, D.I. Petukhov, M.A. Topchiy, A.F. Asachenko, X.-K. Ren, M.V. Bermeshev *J. Membr. Sci.*, 2023, 677, 121624.

ТРАНСФОРМАЦИИ 2-(ПЕНТАФТОРФЕНИЛ)-4Н-ХРОМЕН-4-ОНА С АЛКИЛАМИНАМИ В АНТИМИКРОБНЫЕ И ПРОТИВОГРИППОЗНЫЕ АГЕНТЫ

Борисевич С.С.^а, Щербаков К.В.^б, Зарубаев В.В.^в, Бургарт Я.В.^б, Салютин В.И.^б

^а Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия.

^б Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УО РАН, Екатеринбург, Россия

^в Санкт-Петербургский научно-исследовательский институт эпидемиологии и микробиологии им. Пастера, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: monrel@mail.ru

В рамках данной работы изучено взаимодействие 2',3',4',5',6'-пентафторфлавона с алкиламинами, приводящее к региоселективному формированию продуктов нуклеофильного ароматического замещения атома фтора по активированному центру С(4'). Механизм протекания химической реакции описан на уровне DFT теории. При оценке биологической активности синтезированных флавонов найдены соединения, имеющие высокое противогрибковое, антигонорейное и противогриппозное действие. С помощью молекулярного докинга показано, что механизм ингибирования вируса гриппа штамма A/Puerto Rico/8/34 (H1N1) полученными флавонами может осуществляться за счет блокирования нейраминидазы (NA) (рисунок 1).

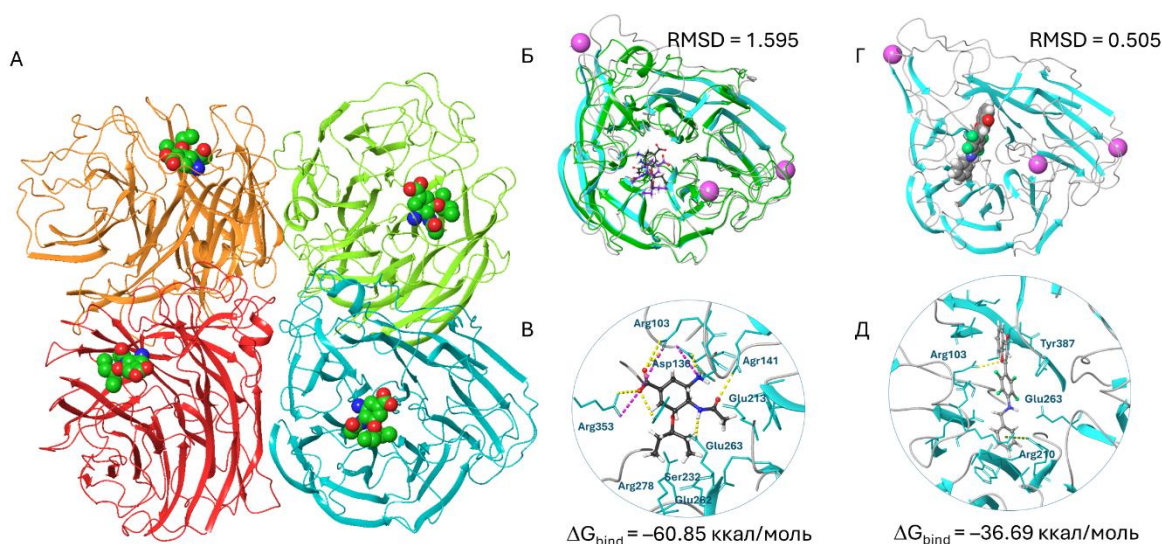


Рисунок 1. Результаты молекулярного моделирования: А — структура тетрамера НА штамма A/California/04/2009(H1N1); Б — выравнивание аминокислотных остатков (а.о.) и расположения осельтамивира в НА штаммов A/California/04/2009(H1N1) и A/Puerto Rico/8/34(H1N1); В — расположение осельтамивира в НА штамма A/Puerto Rico/8/34(H1N1): показаны межмолекулярные взаимодействия между атомами лиганда и а.о. в радиусе 3 Å; Г — расположение соединения лидера в НА штамма A/Puerto Rico/8/34(H1N1); Д — показаны межмолекулярные взаимодействия между атомами лиганда и а.о. НА штамма A/Puerto Rico/8/34(H1N1). Водородные связи показаны желтыми прерывистыми линиями, солевые мостики — фиолетовыми, π -катион-стекинг взаимодействия — зелеными, сиреневыми шариками — Ca^{2+} .

НОВЫЕ СИНТЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ В ХИМИИ АДАМАНТИЛСОДЕРЖАЩИХ
ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**Бутов Г.М.^а, Мохов В.М.^б, Дьяченко В.С.^а, Гладких Б.П.^а, Аль-Фанхарави А.Х.А.^б**^аВолжский политехнический институт (филиал) ВолгГТУ, Волжский, Россияe-mail: butov@post.volpi.ru^бВолгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия

Исследованы химические превращения азолов, пирролов, пиридинов, пиримидинов и их бензанелированных аналогов, гидантоинов и урацилов в реакциях с производными адамантана: изо(изотио)цианатами, аминами, 1,3-дегидроадамантаном (1,3-ДГА) [1-2].

Изучены реакции различных классов азолов: 1H-пиразолы и их производные, изоксазолы, 1H-имидазолы и бензимидазолы, 1H-1,2,4-триазолы, 1H-тетразолы с 1,3-ДГА. Установлено наличие нескольких маршрутов реакций: N- и C-алкилирование азолов, а также диадамантирование. Показано, что реакции протекают преимущественно по N-H-связи азолов, не зависимо от природы и количества заместителей в азольном цикле. Осуществлены реакции азолов, пиридинов, содержащих функциональные (-OH, -COOH, -NH₂, -SH, Hal) или -CH₃ -группы, с 1,3-ДГА, с образованием труднодоступных адамантилсодержащих гетероциклических соединений.

Разработаны способы получения циклических аналогов адамантилсодержащих 1,3-дизамещенных мочевины – имидазолидин-2,4,5- и пиримидин-2,4,6-трионов по реакции соответствующих мочевины с хлорангидридами щавелевой и малоновой кислот [3-4].

Реакцией (адамантан-1-илалкил)гетероалленов с гидрохлоридом этилового эфира глицина в мягких условиях синтезирован ряд 3-(адамантан-1-илалкил)-2-(O-, S-, Se-)гидантоинов с выходами 75–85%. Установлено влияние структуры адамантан-1-илалкиламина на выходы гидантоинов [5].

Синтезирован труднодоступный 1-(1-адамантил)-3,4,5-тринитро-1H-пиразол (AdTNP) устойчивый при нагревании до 180 °C [6]. Показана высокая селективность AdTNP по 5-NO₂-группе в реакциях с N-, S- и O-нуклеофилами различной природы.

Изучена биологическая и антиоксидантная активность некоторых соединений, получены QSAR-зависимости. Методом виртуального *in silico* скрининга обнаружены молекулы, способные имитировать фосфопептидный участок в tBRCT домене белка BRCA1, что может привести к гибели раковых клеток.

Литература

1. V. V. Burmistrov, C. Morisseau, T. K. Shkineva, D. V. Danilov, B. P. Gladkikh, G. M. Butov, R. R. Fayzullin, T. Ya. Dutova, B. D. Hammock, I. L. Dalinger *Journal of Fluorine Chemistry*. 2023, **266**, 110087
2. V.S. D'yachenko, D.V. Danilov, T.K. Shkineva, I.A. Vatsadze, V.V. Burmistrov, G.M. Butov *Chem. Heterocycl. Comp.* 2019, **55**, 129.
3. V.S. D'yachenko, V.V. Burmistrov, K. Nishi, I.H. Kim, G.M. Butov *Chem. Heterocycl. Comp.* 2017, **53**, 1080.
4. V. Burmistrov, C. Morisseau, V. D'yachenko, D. Karlov, G.M. Butov, B.D. Hammock *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 2020. **30**, 126908
5. V.V. Burmistrov, D.A. Pitushkin, V.V. Vasipov, V.S. D'yachenko, G.M. Butov *Chem. Heterocycl. Comp.*, 2019, **55**, 619.
6. G. M. Butov, B. A. Lysykh, I. L. Dalinger, I. A. Vatsadze, T. K. Shkineva, Y. N. Klimochkin, V. A. Osyenin *Chem. Heterocycl. Comp.*, 2014, **50**, 752

Работа выполнена за счет средств программы развития ВолгГТУ «Приоритет 2030», в рамках научного проекта № 45/645-24.

ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ МОНОТЕРПЕНОИДОВ: СИНТЕЗ И
БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

Волчо К.П., Ильина И.В., Патрушева О.С., Ли-Жуланов Н.С., Цыпышев Д.О.,
Хоменко Т.М., Мункуев А.А., Суслов Е.В., Салахутдинов Н.Ф.

*Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения РАН, химический
факультет, пр. Лаврентьева 9, Новосибирск, Россия.
e-mail: volcho@nioch.nsc.ru*

Монотерпены и их кислородсодержащие производные, монотерпеноиды, являются одними из самых распространенных природных соединений, будучи мажорными компонентами разнообразных эфирных масел и скипидаров. Сочетание доступности, в том числе, в энантиомерно чистом виде, нативной биологической активности и наличие реакционно-способных функциональных групп делает монотерпены и монотерпеноиды перспективными исходными соединениями для дизайна новых биологически активных соединений. Особенно эффективным является создание на основе монотерпенов гетероциклических соединений, как присоединением к монотерпеноиду готового гетероциклического фрагмента, так и включением атомов углерода монотерпенового остова в состав формирующегося гетероцикла.

В результате проведенных исследований нами разработаны эффективные подходы, позволившие осуществить синтез библиотек производных монотерпенов, содержащих гетероциклические фрагменты, среди которых выявлены соединения, проявившие высокую биологическую активность, включая противоопухолевые, противовирусные или анальгетические свойства. Особое внимание уделяется поиску соединений-синергистов, способных усиливать противоопухолевую активность применяющихся в клинической практике лекарственных препаратов за счет ингибирования ферментов TDP1 или HDAC.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-73-20089).

ЭЛЕКТРОНОДЕФИЦИТНЫЕ АЛКИНЫ – УНИВЕРСАЛЬНЫЕ СИНТОНЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ
КОНДЕНСИРОВАННЫХ АЗАГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

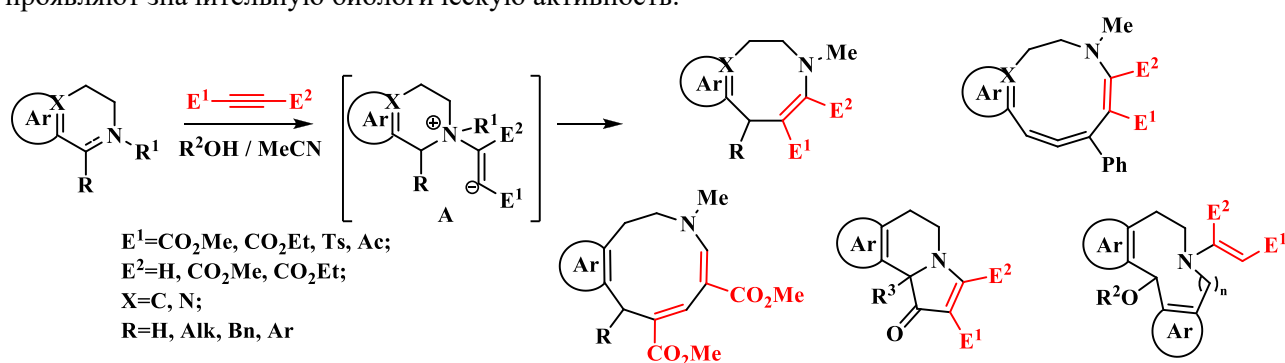
Воскресенский Л.Г.

Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы, Москва, Россия

e-mail: voskresenskiy-lg@rudn.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 азагетероциклами.

Относительно недавно были разработаны методы синтеза аннелированных 5,6-членных азагетероциклов, а также средних циклов с фармакофорными группами, с применением электронодефицитных алкинов. Показанные процессы представляют собой домино-реакции и многокомпонентные реакции и протекают через образование ключевого промежуточного продукта - цвиттер-иона А [1-4]. Многие из полученных соединений проявляют значительную биологическую активность.



Литература

1. A.V. Listratova, L.G.Voskressensky. *Synthesis*, 2017, **49**, 3801.
2. L.G. Voskressensky, T.N. Borisova, A.A. Titov, A.V. Listratova, L.N. Kulikova, A.V. Varlamov, V.N. Khrustalev, G.G. Aleksandrov. *Russian Chemical Bulletin.*, 2012, **61**, 1231.
3. M. Matveeva, A. Golovanov, T. Borisova, A. Titov, A. Varlamov, A. Shaabani, A. Obydennik, L. Voskressensky. *Molecular Catalysis*, 2018, **461**, 67.
4. A.A. Titov, M. Niso, M. De Candia, M.S. Kobzev, A.V. Varlamov, T.N. Borisova, L.G. Voskressensky, N.A. Colabufo, S. Cellamare, L. Pisani, C.D. Altomare. *Future Medicinal Chemistry*, 2019, **11**, 2095.

АМБИФИЛЬНЫЕ АЗОТ- И ФОСФОРСОДЕРЖАЩИЕ ГЕТЕРОЦИКЛЫ В СИНТЕЗЕ (ПОЛИ)ЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

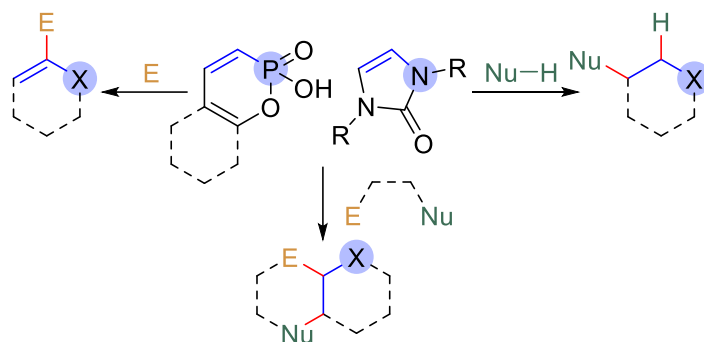
Газизов А.С.^а, Кузнецова Е.А.^а, Камалетдинов А.З.^{а,б}, Смолобочкин А.В.^а,
Залалтдинова А.В.^а, Садыкова Ю.М.^а, Бурилов А.Р.^а, Пудовик М.А.^а

^аИОФХ им. А.Е. Арбузова – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН,
420088, Российская Федерация, Казань, ул. Арбузова, 8

^бКазанский национальный исследовательский технологический университет,
420015, Российская Федерация, Казань, ул. К.Маркса, 68.

e-mail: agazizov@iopc.ru

Амбифильные соединения, способные выступать как в качестве электрофильных, так и в качестве нуклеофильных реагентов, представляют значительный интерес для синтетической химии. В большинстве случаев, в структуру подобных соединений входит гетероатом (азот, кислород и т.д.), являющийся, как правило, нуклеофильным центром. Весьма привлекательными классами ненасыщенных соединений, в которых в качестве и нуклеофильного, и электрофильного центра выступают атомы углерода, являются некоторые азот- и фосфорсодержащие гетероциклы, в частности, имидазолин-2-оны [1,2] и фосфакумарины [3]. Представленный доклад обобщает результаты наших исследований в этой области и демонстрирует широчайшие возможности этих классов гетероциклов в синтезе различных (поли)циклических структур.



Литература

1. A.S. Gazizov, E.A. Kuznetsova, A.Z. Kamaletdinov, A. V. Smolobochkin, O.A. Lodochnikova, D.P. Gerasimova, A.R. Burilov and M.A. Pudovik, *Org. Chem. Front.*, 2023, **10**, 4550.
2. E.A. Kuznetsova, R.R. Rysaeva, A. V. Smolobochkin, A.S. Gazizov, T.P. Gerasimova, D.P. Gerasimova, O.A. Lodochnikova, V.I. Morozov, S.Z. Vatsadze, A.R. Burilov and M.A. Pudovik, *Org. Lett.*, 2024, **26**, 4323.
3. A. V. Zalatdinova, Y.M. Sadykova, A.S. Gazizov, A.K. Smailov, V. V. Syakaev, D.P. Gerasimova, E.A. Chugunova, N.I. Akylbekov, R.U. Zhapparbergenov, N.O. Appazov, A.R. Burilov, M.A. Pudovik, I. V. Alabugin and O.G. Sinyashin, *Int. J. Mol. Sci.*, 2024, **25**, 6327.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 25-73-20015, <https://rscf.ru/project/25-73-20015/>).

**ПРИРОДНЫЕ МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ:
ХИМИЧЕСКИЕ МОДИФИКАЦИИ И БИМЕДИЦИНСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ**

Грин М.А.

*Институт Тонких Химических Технологий им. М.В. Ломоносова, МИРЭА – Российский Технологический
Университет, Москва, Россия
e-mail: michael_grin@mail.ru*

Природные хлорины являются уникальным классом фотоактивных соединений, сочетающих в себе фотоиндуцированную активность для реализации фотодинамической терапии, диагностический потенциал вследствие высоких флуоресцентных свойств и туморотропность, которая определяется особенностью строения хлоринового макрогетероцикла.

Используя хлорины и бактериохлорины в качестве ключевой субстанции нами была разработана технология получения, проведены доклинические испытания нового инфракрасного фотосенсибилизатора на основе природного бактериохлорофилла *a* для фотодинамической терапии рака (импортзамещение препарата «Тукад» (Израиль, Реховот) для глубокозалегающих и пигментированных опухолей). Имеется лабораторный регламент получения препарата, проведены первичные испытания по безопасности и специфической активности.

Разработан медицинский гель на основе природных хлоринов для лечения воспалительных заболеваний тканей пародонта и раневых инфекций методом антимикробной фотодинамической терапии. Получены инновационные фотосенсибилизаторы для антимикробной фотодинамической терапии в рамках борьбы с множественной устойчивостью микроорганизмов к антибиотикам.

Создается портативный комплект для лечения инфицированных раневых поверхностей в амбулаторных условиях.

Создан радиофармпрепарат направленного действия для радионуклидной диагностики в онкологии. Разработана технология получения РФП с радионуклидом ^{99m}Tc и пройдены доклинические испытания на клеточном и организменном уровне.

Разработан фотосенсибилизатор с двойным таргетингом на основе природных хлоринов с простат-специфичным мембранным антигеном (ПСМА) для использования в онкоурологии (импортзамещение препаратов для диагностики и лечения рака предстательной железы).

Развивается направление фотофармакологии, связанное с созданием конъюгатов природных хлоринов с азабензолами комбинированного фотодинамического и местноанестетического действия.

Исследование проведено в рамках проекта "НИЧ-РАДИОФАРМПРЕПАРАТЫ-П25" в рамках реализации Программы стратегического академического лидерства РТУ МИРЭА «Приоритет-2030»

РЕАКЦИИ РЕЦИКЛИЗАЦИИ ФУРАНОВОГО ЦИКЛА ПРИ КОНДЕНСАЦИИ ФЕНОЛОВ И ФУРФУРОЛОВ В УСЛОВИЯХ КАТАЛИЗА КОМПЛЕКСАМИ БОРА

Гутнов А.В.^а, Чаликиди П.Н.^а, Демидов О.П.^б, Абасев В.Т.^а

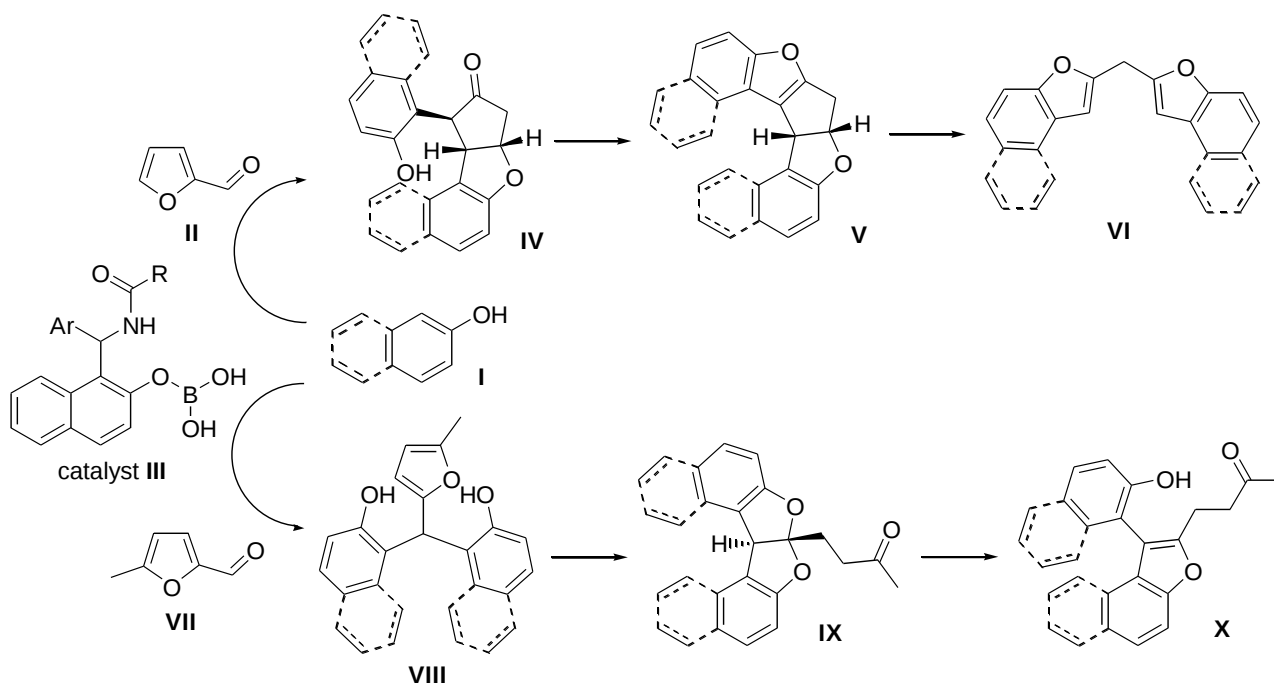
^аСеверо-Осетинский государственный университет имени К.Л. Хетагурова,
кафедра органической химии, Владикавказ, Россия.

e-mail: gutnov@mail.ru

^бСеверо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия.

При реакции 2-нафтола **I** (2 экв.) и фурфурола **II** (1 экв.) в кипящем толуоле в присутствии каталитических количеств комплексов бора **III** было выделено производное 10,10-дигидроциклопента[*b*]нафто[1,2-*d*]фурана **IV** [1]. Многостадийный механизм реакции предположительно представляет собой редкий случай перегруппировки карбо-Пианкателли. Производное **IV** в кислых условиях циклизуется в септациклическое соединение **V**, которое в условия реакции претерпевает разрыв С-С связи, давая динафтофурилметан **VI**.

Похожая реакция в случае 5-метилфурфуrolа **VII** идет по другому пути и приводит в зависимости от строения фенольной компоненты **I** либо к 5-метилфурил(диарилметанам) **VIII**, либо к производным фуро[3,2-*d*]фурана **IX**, которые являются продуктами рециклизации 5-метилфуранового цикла в соединениях **VIII**. Рециклизация включает в себя стадии протонирования фуранового цикла, реакцией образующегося карбокатиона с фенольными гидроксилами и высвобождением бутанонового фрагмента. При обработке производных фуро[3,2-*d*]фурана **IX** сильными кислотами происходит расщепление одного из фурановых циклов и образование бензофуранов **X**.



Литература

1. А.В. Гутнов, В.Т. Абасев, О.П. Демидов. *Химия гетероциклических соединений*, 2019, **55**(3), 280.

ДИАЗОСОЕДИНЕНИЯ В СИНТЕЗЕ ГЕТЕРОЦИКЛОВ.
ПОЛУЧЕНИЕ 1,2,4-ТРИАЗОЛОВ

Дарьин Д.В., Кузнецов Р.А., Кантин Г.П.

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

Дiazосоединения, обладая невероятно разнообразной реакционной способностью, представляют собой уникальную платформу для синтеза различных гетероциклических соединений [1-3]. Большинство синтетических методов с применением диазореагентов основано на их разложении и генерации карбеновых интермедиатов. Более редкие, но не менее эффективные превращения протекают с сохранением атомов азота диазогруппы и встраиванием их в формируемый цикл.

Одной из таких реакций является взаимодействие диазокарбонильных соединений с азлактонами, приводящее к производным 1,2,4-триазолов (Схема 1). Развиваемый метод характеризуется универсальностью, доступностью и вариабельностью субстратов, высокими выходами и полной региоселективностью. Несомненным преимуществом данного подхода является возможность генерации азлактона из *N*-ацилированных аминокислот *in situ*. Учитывая также потенциальные пост-модификации с формированием дополнительного цикла, данная методология открывает путь к невероятно широкому химическому пространству структурно разнообразных производных 1,2,4-триазола, относящегося к одним из наиболее востребованных скаффолдов в области медицинской химии.

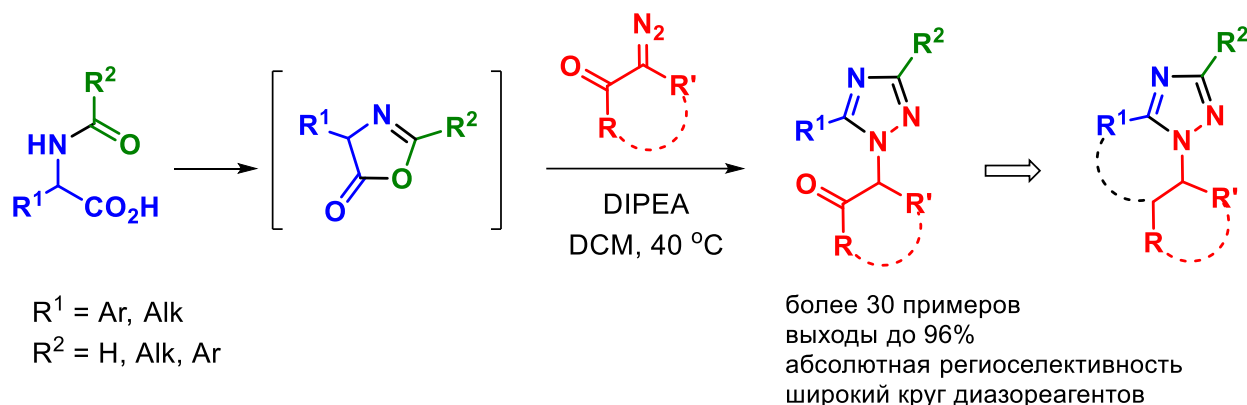


Схема 1. Региоселективный синтез полизамещенных 1,2,4-триазолов взаимодействием азлактонов с диазокарбонильными реагентами.

Литература

1. A. Budeev, G. Kantin, D. Dar'in, M. Krasavin. Diazocarbonyl and Related Compounds in the Synthesis of Azoles. *Molecules* 2021, **26**, 2530.
2. P. Soam, P. Kamboj, V. Tyagi. Rhodium-Catalyzed Cascade Reactions using Diazo Compounds as a Carbene Precursor to Construct Diverse Heterocycles *Asian J. Org. Chem.* 2022, **11**, e202100570.
3. K. Malkova, D. Dar'in. Diazo-Based Construction of Heterocyclic Systems Via a X–H Insertion/Cyclization Cascade. *Eur. J. Org. Chem.* 2024, **27**, e202400909.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-13-68019.

ТИЕНО[2,3-*b*]ПИРИДИНЫ: НОВЫЕ РЕАКЦИИ И ПРИМЕНЕНИЕ В АГРОХИМИИ

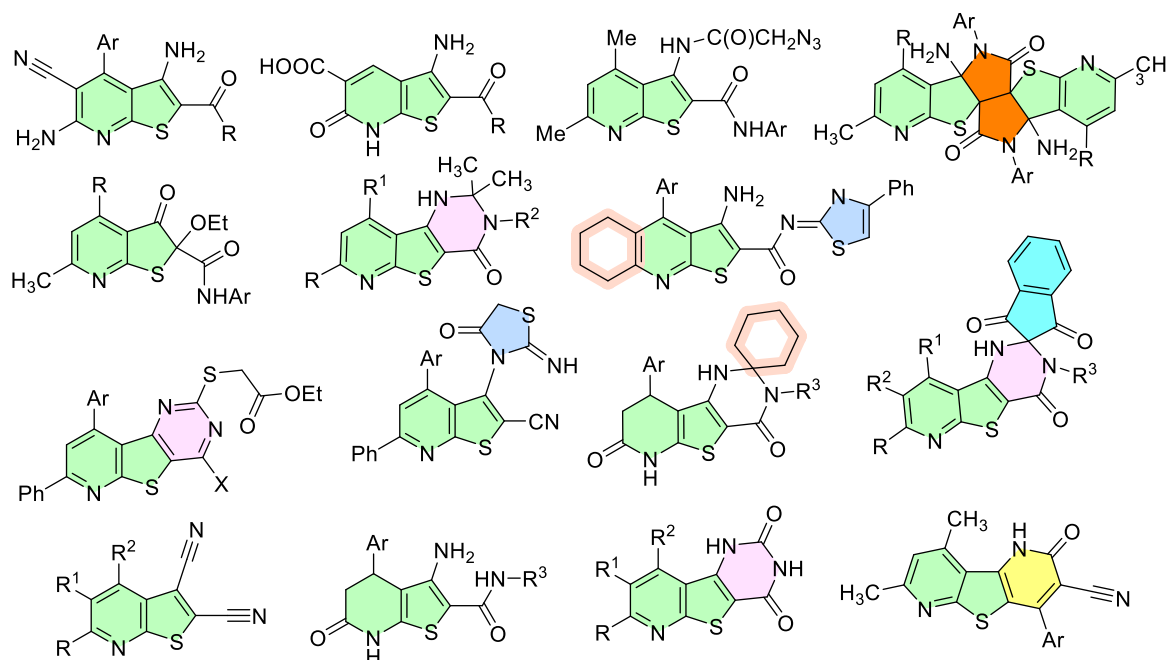
**Доценко В.В.^{а,б}, Лукина Д.Ю.^а, Беспалов А.В.^а, Попов Ф.А.^а, Бурый Д.С.^а,
Киндоп В.К.^а, Русских А.А.^а, Киндоп Вл.К.^а, Корсунов А.В.^а, Руденко С.В.^а, Аксенов Н.А.^б**

^аКубанский государственный университет,
350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Россия.

e-mail: victor_dotsenko@mail.ru

^бСеверо-Кавказский федеральный университет,
355017, Ставрополь, ул. Пушкина 1, Россия.

Тиено[2,3-*b*]пиридины имеют более чем столетнюю историю, и в целом являются достаточно изученным классом соединений [1-4]. Несмотря на это, потенциал этих соединений далеко не исчерпан как в отношении превращений, так и в контексте практического использования. В настоящем докладе представлены новые способы конструирования тиенопиридиновой системы, новые способы модификации. Представлены авторские результаты по исследованиям биологического действия тиенопиридинов в качестве регуляторов роста растений и антидотов гербицида 2,4-Д.



Литература

1. В. П. Литвинов, В. В. Доценко, С. Г. Кривоколыско *Изв. АН. Сер. Хим.*, 2005, № 4, 847.
2. В. В. Доценко, Д. С. Бурый, Д. Ю. Лукина, С. Г. Кривоколыско *Изв. АН. Сер. Хим.*, 2020, № 10, 1829.
3. V. P. Litvinov, V. V. Dotsenko, S. G. Krivokolysko *Adv. Heterocycl. Chem.*, 2007, **93**, 117.
4. В. П. Литвинов, В. В. Доценко, С. Г. Кривоколыско *Химия тиенопиридинов и родственных систем*. М., Наука, 2006, 406 с.

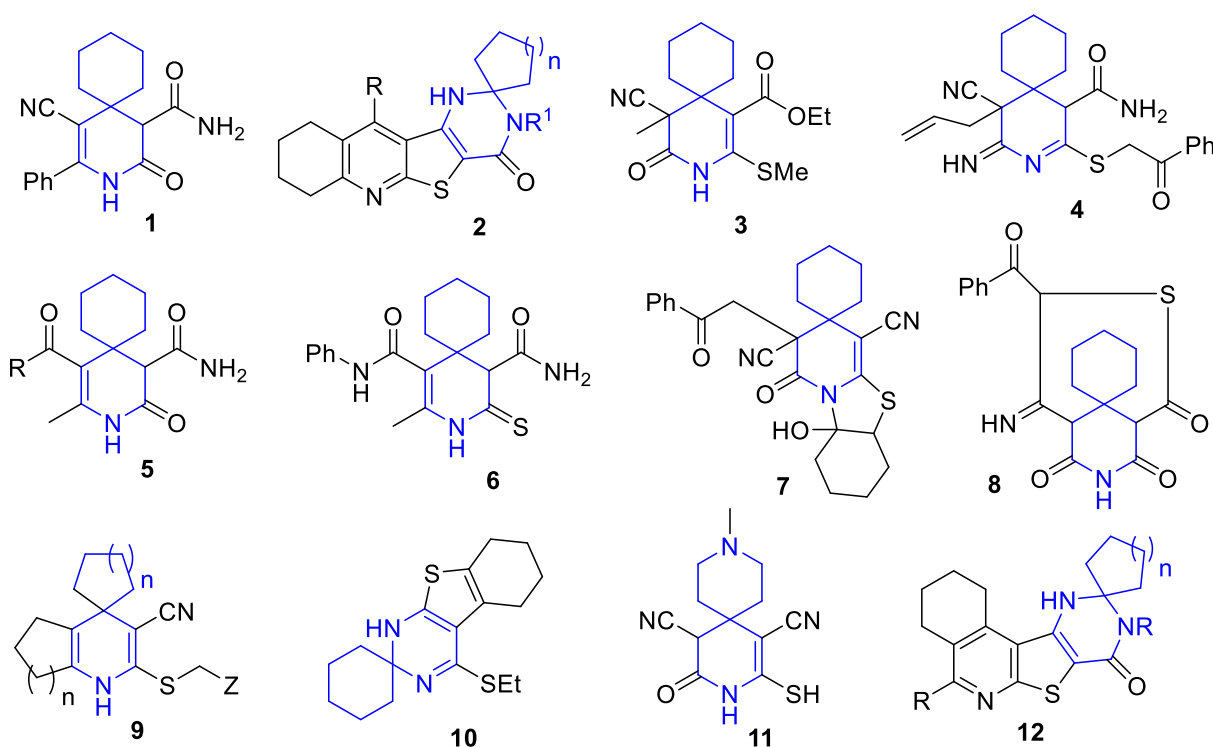
Исследование выполнено при финансовой поддержке Кубанского научного фонда в рамках научного проекта № Н-24.1/30.

СПИРОЗАМЕЩЕННЫЕ ПИРИДИНЫ И ПИРИМИДИНЫ – СИНТЕЗ, РЕАКЦИИ И ПЕРСПЕКТИВНАЯ БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

Дяченко В.Д.

Луганский государственный педагогический университет,
Институт естественных наук, Луганск, Россия.
e-mail: dyachvd@mail.ru

В ходе наших исследований разработаны удобные методы синтеза спирозамещенных производных пиридина и пиримидина **1-12**, а также изучены некоторые особенности региоселективности их алкилирования [1-6]. Синтезированные функционализированные пиримидины являются потенциальными полупродуктами при создании противомикробных, антиастматических и обезболивающих препаратов. Для однозначного установления строения некоторых продуктов реакций применялся метод рентгеноструктурного анализа.



Литература

1. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Org. Chem.* 2020, **56**, 974.
2. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. Chem. Bull.*, 2021, **70**, 949.
3. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Org. Chem.*, 2021, **57**, 1809.
4. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, G.M. Abakarov, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Org. Chem.*, 2023, **59**, 969.
5. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Gen. Chem.*, 2024, **94**, 1217.
6. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Org. Chem.*, 2024, **60**, 588.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕХАНОСИНТЕЗА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Зырянов Г.В.^{а,б}, Сантра С.^б, Чарушин В.Н.^{а,б}, Чупахин О.Н.^{а,б}, Рану Б.Ч.^б

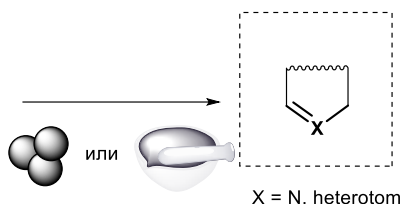
^а Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского,
Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия

^б Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

e-mail: g.v.zyrianov@urfu.ru

В последнее время использование механосинтеза для направленного синтетического дизайна органических молекул привлекает внимание исследователей в различных отраслях химии, начиная от синтеза лекарственных препаратов и заканчивая индустриальными процессами. В отличие от традиционных методов, связанных с использованием растворителей и высоких затратах энергии на нагрев и охлаждение, механосинтез осуществляется при комнатной температуре, механическая энергия используется для активации химических превращений [1-5].

В рамках настоящего сообщения будут представлены основные результаты, связанные с применением механосинтеза для получения ряда перспективных гетероциклов.



Литература

1. O. Bento, F. Luttringer, T. M. E. Dine, N. Pétry, X. Bantreil, F. Lamaty *Eur. J. Org. Chem.*, 2022, **21**, <https://doi.org/10.1002/ejoc.202101516>
2. H.R. Chaudhary, D.M. Patel *Mol Divers*, 2024, <https://doi.org/10.1007/s11030-024-11053-x>
3. C. Grundmann, H. Frommeld, K. Flory, S. K. Datta *J. Org. Chem.*, 1967, **33**, 1464.
4. F. Effaty, X. Ottenwaelder, T. Frišćić *Curr. Opin. Green Sustainable Chem.*, 2021, **32**, 100524
5. T. Frišćić, C. Mottillo, H.M. Titi *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, **132**, 1030
6. F. Cuccu, L. Luca, F. Delogu, E. Colacino, N. Solin, R. Mocci, A. Porcheddu *Chem. Sus. Chem.*, 2022, **15**, e202200362

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-73-30016).

ОТ ЦИКЛОПРОПАНОВ К ГЕТЕРОЦИКЛАМ: РЕАКЦИИ РАСКРЫТИЯ
ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫХ ЦИКЛОПРОПАНОВ АЗАНУКЛЕОФИЛАМИ

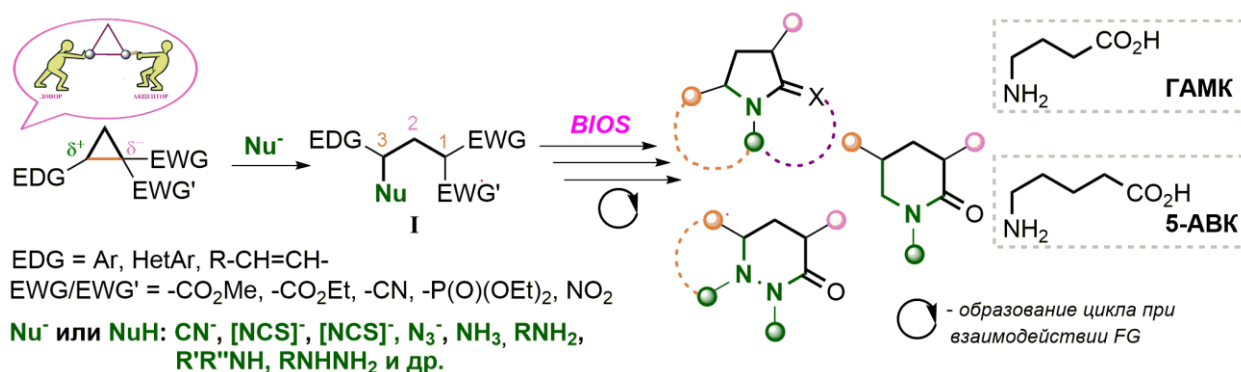
Иванова О.А.^а, Бойченко М. А.^а, Жохов С. С.^а, Тарасенко Е. А.^а, Ратманова Н. К.^б,
Андреев И. А.^б, Трушков И. В.^в

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.

^бФакультет физико-математических и естественных наук Российского университета дружбы народов
имени Патриса Лумумбы

^вИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН
e-mail: iv@kinet.chem.msu.ru

Одна из стремительно развивающихся синтетических стратегий, ориентированных на получение биоактивных природных и синтетических соединений («*biology-oriented syntheses*, BIOS»), – раскрытие донорно-акцепторных циклопропанов (ДАЦП), как пуш-пульных систем, азануклеофилами [1-4]. Эти реакции приводят к получению ациклических полифункциональных соединений **I**, содержащих труднодостижимое другими способами 1,3-взаимное расположение функциональных групп. В свою очередь, эти соединения могут быть интермедиатами или полупродуктами в синтезе циклических и полициклических соединений за счет вторичных взаимодействий функциональностей, присутствующих в их молекулах. При этом, раскрытие ДАЦП азануклеофилами открывает простой путь к производным γ -аминомасляной (ГАМК), ω -аминовалериановой (5-АВК) кислот и их циклическим производным, пирроло[2,1-*a*]изохинолиновым алкалоидам и другим азаетероциклам, занимающим привилегированное место в медицинской органической химии. На основе реакций ДАЦП с азануклеофилами (аммиаком, первичными аминами, гидразинами, цианид-, изо(тио)цианат-, изоцианат-, азид-ионами и др.) нами разработаны новые методы синтеза производных пирролидин-2-онов, пергидропиридазинов, 2-аминофуранов, тетра-гидробенз[*b*]азепинов, тетрагидропирроло[1,2-*a*]хинолинов, тетрагидропиридазинов и др.



Литература

1. Donor-Acceptor Cyclopropanes in Organic Synthesis (Eds.: A. Biju, P. Banerjee), Wiley-VCH, Weinheim, 2024, 448 pp.
2. S. M. Antropov, S. A. Tokmacheva, I. I. Levina, O. A. Ivanova, I. V. Trushkov *J. Org. Chem.*, 2025, **90**, <https://doi.org/10.1021/acs.joc.5c00928>.
3. M. N. Anisimov, M. A. Boichenko, V. V. Shorokhov, Ju. N. Borzunova, M. Janibekova, V. V. Mustyatsa, I. A. Lifshits, A. Yu. Plodukhin, I. A. Andreev, N. K. Ratmanova, S. S. Zhokhov, E. A. Tarasenko, D. A. Ipatova, A. R. Pisarev, I. A. Vorobjev, I. V. Trushkov, O. A. Ivanova, N. B. Gudimchuk *RSC Med. Chem.* 2025, **16**, 274.
4. A. Yu. Plodukhin, M. A. Boichenko, I. A. Andreev, E. A. Tarasenko, K. V. Anisovich, N. K. Ratmanova, S. S. Zhokhov, I. V. Trushkov, O. A. Ivanova *Org. Biomol. Chem.* 2024, **22**, 1027.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-73-20019).

СИНТЕЗЫ НА ОСНОВЕ АЛЛИЛПИРИДИНИЕВЫХ СОЛЕЙ

**Климочкин Ю.Н., Богданова А.Н., Баймуратов М.Р.,
Ширяев В.А., Сокова Е.А., Анурьев И.А.**

*Самарский государственный технический университет, 443100, Самара, Молодогвардейская 244,
e-mail: orgchem@samgtu.ru*

В докладе рассматриваются особенности химических превращений моно- и биспиридиновых солей аллильного типа, содержащих объемные структурные фрагменты, предопределяющие конфигурацию кратной связи, в условиях катализа основаниями. Биспиридиновые соли при этом превращаются в соли диенилпиридиния, для которых в реакциях циклоприсоединения в первичных аддуктах происходит неожиданное отщепление пиридина. Взаимодействие таких солей с сульфиниламинами дает 3-замещенные тиофены. Кватернизированные стирилпиридины в зависимости от субстрата и условий позволяют получить пиридилциклопропаны, моно-, ди- и тризамещенные индолизины. Обсуждаются механизмические аспекты превращений.

ДИАЗОТИРОВАНИЕ АМИНОПИРИДИНОВ: НОВЫЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ ПРАКТИЧЕСКИ ВАЖНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДИНА

Краснокутская Е.А., Филимонов В.Д., Бондарев А.А., Ерин К.Д., Минаев Н.С.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Научно-образовательный центр
Н.М. Кижнера, Томск, Россия.*

e-mail: eak@tpu.ru

Ароматические соли диазония являются важными строительными блоками современного органического синтеза. Ранее нами синтезирован и исследован ряд арендиазоний сульфонатов (тозилаты, трифлаты) – устойчивых при хранении, безопасных в работе и реакционно способных соединений [1].

Показано, что диазотирование аминопиридинов в присутствии *p*-TsOH, TfOH, камфорасульфокислоты (CampSO₃H) приводит к образованию неустойчивых солей диазония, которые быстро распадаются до пиридиндиазониевого катиона. Последний легко взаимодействует со всеми нуклеофилами, присутствующими в реакционной смеси. Указанное превращение легло в основу новых методов получения практически важных производных пиридина (PyX): PyI, PyNHAc [2], PyOTs, PyOTf [3], PyOSO₂Camph [4], PyOCH(CF₃)₂ [5], PyNMe₂, [6].

Установлено, что диазотирование 2-, 3- и 4-аминопиридин-1-оксидов **1** в присутствии *p*-TsOH, TfOH, CampH₃SO₃OH обеспечивает образование ранее неизвестных 1-оксидопиридиндиазоний сульфонатов **2** (схема 1), идентификация которых проводилась методами ИК, ЯМР, рентгеноструктурного анализа, масс-спектрометрией, а также B3LYP/aug-cc-pVDZ [7]. Структуры продуктов **2**, их устойчивость при хранении зависят от типа исходного аминопиридина. Все соли диазония **2** легко вступают в реакции, типичные для диазониевых солей.

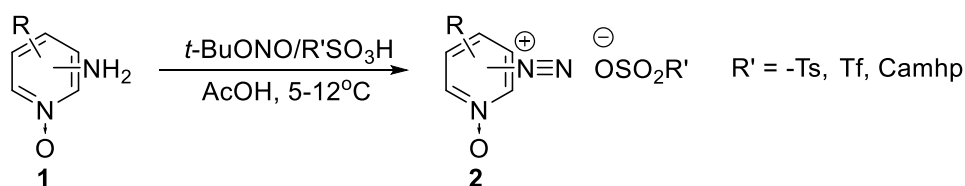


Схема 1

Литература

1. Filimonov V.D., Krasnokutskaya E.A., Bondarev A.A. Eds. Chehimi M., Pinson J., Mousli F. Cham: Springer, 2022, 35.
2. Krasnokutskaya E.A., Semenischeva N.I., Filimonov V.D., Knochel P. *Synthesis*, 2007, **1**, 81.
3. Kassanova A.Z., Krasnokutskaya E.A., Beisembai P.S., Filimonov V.D. *Synthesis*, 2016, **48**, 256.
4. Санжиев А.Н., Краснокутская Е.А., Ерин К.Д., Филимонов В.Д. *ЖОрХ*, 2021, **57**, 842.
5. Filimonov V.D., Sanzhiev A.N., Gulyaev R.O., Krasnokutskaya E.A., Bondarev A.A. *Chem. Heterocycl. Compd.*, 2022, **58**, 721.
6. Санжиев А.Н., Потапова М.И., Краснокутская Е.А., Филимонов В.Д. *ЖОрХ*. 2020, **56**, 920.
7. Краснокутская Е. А., Санжиев А. Н., Ерин К. Д., Бондарев А. А., Потапов А. С., Филимонов В. Д. *ЖОрХ*, 2025, **61**, 88.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Наука № FSWW-2023-0008).

СОЗДАНИЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ
β-ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ГЕМ-ГАЛОГЕННИТРОАЛКЕНОВ

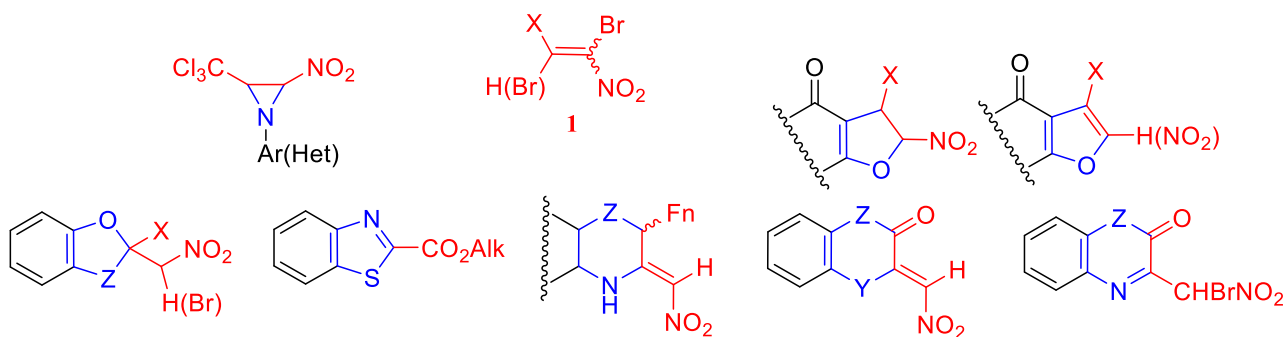
Макаренко С.В.

Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена,
Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: kohrgpu@yandex.ru

Оригинальные представители широкого класса сопряженных нитроалкенов – гем-галогеннитроалкены активно изучаются в различных химических превращениях [1], направленных в том числе на синтез гетероциклических веществ [2, 3].

β-Функционализированные гем-галогеннитроалкены, содержащие в молекуле высокоэлектрофильную кратную С=С связь, являются эффективными субстратами в реакциях с нуклеофильными реагентами.

В докладе рассмотрены синтетические возможности и особенности химии β-функционализированных гем-бромнитроалкенов **1**, на основе которых получают разнообразно построенные гетероциклические соединения.



Также в докладе обсуждаются особенности строения полученных гетероциклов.

Литература

1. R. G. Soengas, R. C. Acurcio, A. M. S. Silva *Eur. J. Org. Chem.* 2014, 6339.
2. K. A. Gomonov, I. A. Pilipenko *Chem. Heterocycl. Compd.* 2023, **59**, 1.
3. V. V. Pelipko, R. I. Baichurin *Chem. Heterocycl. Compd.* 2020, **56**, 1277.

Работа выполнена в рамках внутреннего гранта РГПУ им. А.И. Герцена (проект №51-ВГ).

РЕАКЦИИ ТИПА ANRORC В ХИМИИ ХИНОКСАЛИН-2-ОНОВ

Мамедов В.А.

Институт органической и физической химии имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, Лаборатория химии гетероциклических соединений, 420088, Россия, г. Казань, ул. Арбузова, д. 8

e-mail: mamedov@iopc.ru

ANRORC реакции занимают особое место в современной химии гетероциклических соединений и играют важную роль в преобразованиях гетероциклов. Тем не менее, насколько разнообразными и интересными не были бы эти перегруппировки, в результате они позволяют конструировать только одно кольцо либо отдельного гетероцикла, либо в составе конденсированной системы. В свете этого рассматриваемая в этом докладе кислотно-катализируемая перегруппировка хиноксалин-2-онов под действием N,N -¹⁻⁷ и N,C -нуклеофильных^{1-4,8} реагентов с образованием гетарилбензимидазол(он)ов представляет особый интерес, так как в отличие от всех известных перегруппировок, протекающих по механизму типа ANRORC, она открывает новый путь к синтезу бигетероциклических систем, в которых оба кольца конструируются одновременно в условиях перегруппировки.

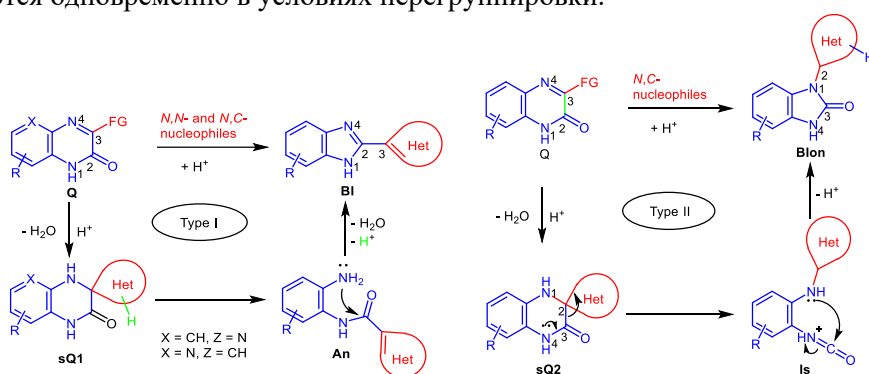


Рисунок. Схематическое изображение перегруппировки (Type I) и (Type II).

Возможность синтеза самых разнообразных 3-функциональнозамещённых производных хиноксалин-2(1H)-она и доступность целого ряда нуклеофильных реагентов указывают на широкие перспективы перегруппировок TYPE I и TYPE II. Перегруппировки применимы и для 5- и 7-азааналогов хиноксалин-2(1H)-онов, таких как пиридо-[3,2-b]- и пиридо[3,4-b]пиазин-2(1H)-оны, и для пиазин-2(1H)-онов и бензо[e][1,4]дiazепин-2(и 3)-онов, что значительно расширяет их синтетический потенциал.

Литература

1. Hassner A., Namboothiri I. *Organic Syntheses Based on Name Reactions*; 3th ed.; Elsevier: Amsterdam, 2012, pp 299-300.
2. Mamedov V.A. // *RSC Advances*, 2016, 6, 42132-42172.
3. Mamedov V.A., Zhukova N.A., Sinyashin O.G. // *Mendeleev Commun.*, 2017, 27, 1-11.
4. Mamedov V.A., Zhukova, N.A. // *Synthesis*, 2021. 53. 1849-1878.
5. Mamedov V.A., Mustakimova L.V., Qu Zh.-W., Zhu H., Syakaev V.V., Galimullina V.R., Shamsutdinova L.R., Rizvanov I.Kh., Gubaidullin A.T., Sinyashin O.G., and Grimme S. // *J. Org. Chem.* 2023, 88, 16864–16890.
6. Mamedov V.A., Zhukova N.A., Syakaev V.V., Gubaidullin A.T., Samigullina A.I., Beschastnova T.N., Perevalova D.S., Babaeva O.B., Rizvanov I.Kh., Sinyashin O.G. // *J. Org. Chem.* 2024, 89, 14577–14585.
7. Mamedov V.A., Galimullina V.R., Qu Zh.-W., Zhu H., Syakaev V.V., Nikolaeva D.V., Rizvanov I.Kh., Gubaidullin A.T., Sinyashin O.G., Grimme S. // *Org. Biomol. Chem.*, 2025, 23, 2180–2189.
8. Mamedov V.A., Khafizova E.A., Algaeva N.E., Latypov Sh.K., Sinyashin O.G. // *J. Org. Chem.*, 2020, 85, 9887-9904.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФ (грант 24-13-00098).

СВОБОДНОРАДИКАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ РАСШИРЕНИЯ АЗИРИНОВОГО ЦИКЛА

Новиков М.С.

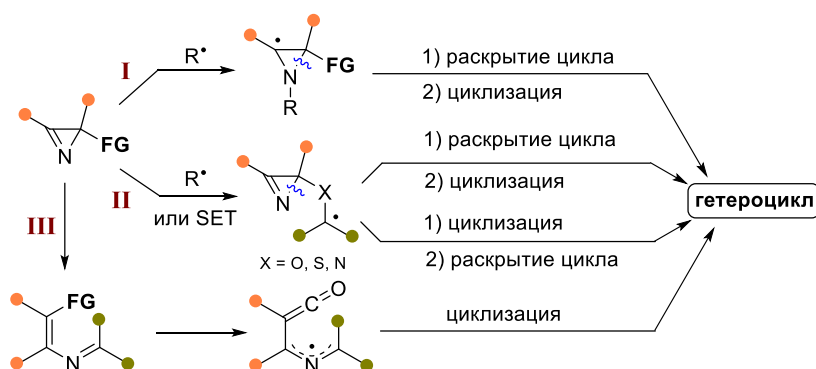
Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,

Санкт-Петербург, Россия.

e-mail: m.novikov@spbu.ru

Свободнорадикальные реакции служат мощным инструментом для формирования связей углерод-углерод и углерод-гетероатом в органических молекулах. Одним из зарождающихся направлений в этой области является использование напряженных циклов, способных либо участвовать в переносе радикального центра, либо служить источником радикалофильных групп для ациклических субстратов радикальных реакций. В представленном докладе обсуждаются перспективы использования 2*H*-азиринов для формирования пяти- и шестичленных гетероциклов через радикальные домино-последовательности расширения трехчленного кольца.

Рассматриваются три общие стратегии расширения азиринового цикла через свободнорадикальные трансформации. Одна из стратегий (стратегия I) предполагает введение в азириновый цикл “запирающей” функциональной группы, обеспечивающей необратимость переноса радикального центра при раскрытии азиринового кольца [1]. В стратегии II используют азирины с радикалофильной функциональной группой, обеспечивающей селективное расширение азиринового цикла под действием радикальных инициаторов [2]. Наконец, третья стратегия (стратегия III) подразумевает перенос радикалофильной функциональной группой из азирина в ациклический субстрат, используемый в радикальной гетероциклизации [3]. Эти направления общей свободнорадикальной методологии расширения азиринового цикла проиллюстрированы на примере синтезов производных пиррола, оксазола, тиазола и 6*H*-1,3-оксазина.

**Литература**

1. A. V. Agafonova, P. A. Sakharov, I. A. Smetanin, N. V. Rostovskii, A. F. Khlebnikov, M. S. Novikov *Org. Chem. Front.*, 2022, **9**, 4118.
2. I. P. Filippov, A. V. Agafonova, G. D. Titov, I. A. Smetanin, N. V. Rostovskii, A. F. Khlebnikov, M. S. Novikov *J. Org. Chem.*, 2022, **87**, 6514.
3. A. V. Agafonova, A. F. Khlebnikov, M. S. Novikov *Org. Lett.* 2025, **27**, in press.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-13-00115) с использованием оборудования РЦ СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества», «Рентгенодифракционные методы исследования» и «Вычислительный центр».

ПОСТРОЕНИЕ ПЯТИ- И ШЕСТИЧЛЕННЫХ АЗОТИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ОСНОВЕ РЕАКЦИЙ КРОСС-СОПРЯЖЁННЫХ ТРИМЕТИЛСИЛИЛЗАМЕЩЁННЫХ ЕНИНОВ И ЕНОВ С АМИНОСОЕДИНЕНИЯМИ

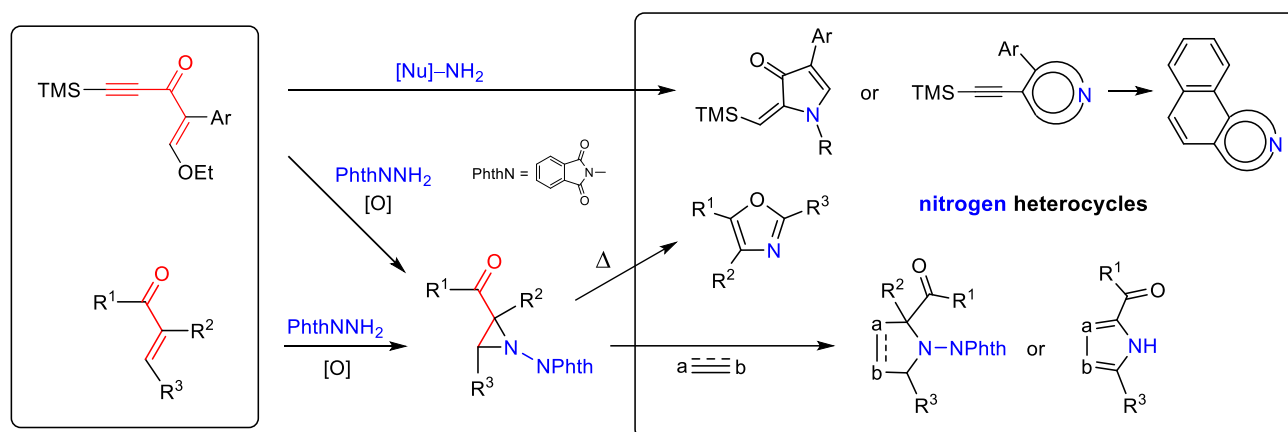
Панькова А.С.

Санкт-Петербургский государственный университет,
Институт химии, Санкт-Петербург, Россия,
e-mail: a.pankova@spbu.ru

Сопряжённые енины и еноны могут служить универсальной платформой для эффективного синтеза разнообразных азотсодержащих гетероциклических соединений.

Селективное взаимодействие предложенных нами кросс-сопряжённых триметилсилилзамещённых енинов с азотистыми моно- и бинуклеофилами позволяет осуществлять построение пяти- и шестичленных гетероциклов с этинильным или метилиденовым заместителем в боковой цепи. В *орто*-арил(этинил)гетероаренах можно реализовать циклизацию в полициклические конденсированные системы в условиях электрофильной активации или катализа металлами [1].

Сочетание окислительного аминоазиридинования енонов и их аналогов с последующей термической генерацией азометинилидов из *N*-фталидидазиридинов и их меж- и внутримолекулярным 1,3-диполярным циклоприсоединением или 1,5-электроциклизацией открывает возможности стереоселективного построения моноциклических и полициклических конденсированных и спиросо́членённых гетероциклов.



Литература

1. A.S. Pankova, A.N. Shestakov, M.A. Kuznetsov *Russ. Chem. Rev.* 2019, **88**, 594–643.

РЕАКЦИИ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ С УЧАСТИЕМ *N*-СУЛЬФОНИЛИМИНОВ
ПОЛИХЛОРАЛЬДЕГИДОВ. НОВЫЕ АСПЕКТЫ

Катеринич М.Д.^а, Розенцвейг И.Б.^{а,б}, Чернышева Г.Н.^а,
Бажанова А.О.^{а,б}, Кондрашов Е.В.^а

^аИркутский институт химии имени А.Е. Фаворского СО РАН, Иркутск, Россия,

^бИркутский государственный университет, химический факультет, Иркутск, Россия.

e-mail: i_roz@irioch.irk.ru

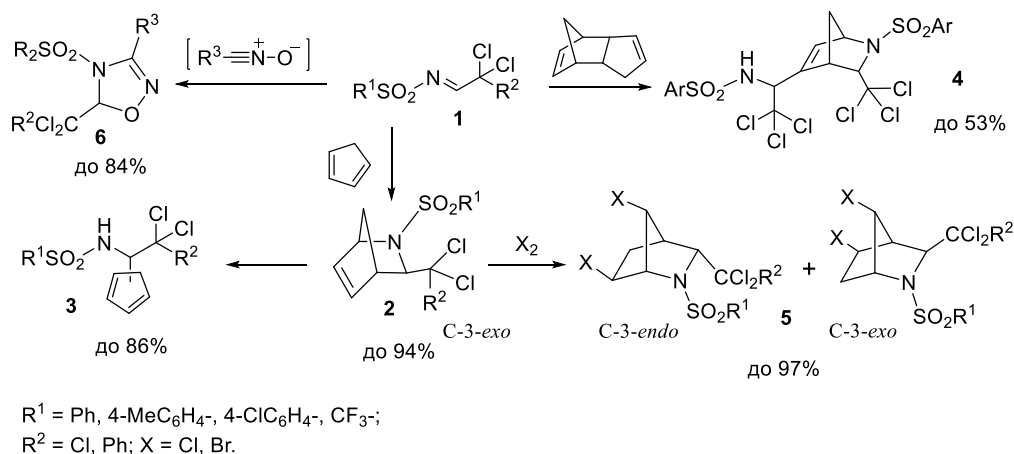
Исследованы новые особенности циклоприсоединения с участием *N*-сульфонилиминов полихлоральдегидов **1** при взаимодействии с цикlopentadiеном и нитрилоксидами.

В зависимости от условий реакция с цикlopentadiеном приводит к [4+2] циклоаддуктам **2**, либо завершается образованием ранее неизвестных амидополихлорэтилированных производных цикlopentadiена **3** [1].

На примере взаимодействия отдельных представителей сульфоилиминов хлораля с димером цикlopentadiена продемонстрирована возможность образования сульфонамидотрихлорэтилированных азабициклопептенов **4**.

Исследовано электрофильное бромирование и хлорирование *N*-сульфонил-3-полихлорметил-2-азанорборненов, которое приводит к продуктам перегруппировки Вагнера-Меервейна **5**. При этом реализуется как классический вариант перегруппировки с участием атома N-2, приводящий к C-6 и C-7 дигалогензамещенным 2-азанорборнам (основной путь), так и альтернативный путь - с участием атома C-3 с образованием изомерных C-5 и C-7 дигалогенированных производных (минорный путь). Последний вариант перегруппировки продемонстрирован в настоящей работе впервые [2].

Впервые исследовано 1,3-диполярное циклоприсоединение с участием синтезированных представителей сульфоилиминов и полученных *in situ* нитрилоксидов. Показано, что реакция протекает региоселективно и с выходами от умеренных до высоких приводит к образованию ранее неизвестных представителей 1,2,4-оксадиазолинов **6**.



Таким образом, продемонстрирован подход к получению труднодоступных производных сульфонамидного ряда, перспективных для изучения биологической активности и реакционной способности.

Литература

1. G.N. Chernysheva, M.D. Katerinich, I.A. Ushakov, I.B. Rozentsveig *Mendeleev Commun.*, 2020, **30**, 618.
2. G.N. Chernysheva, M D. Katerinich, I A. Ushakov, T N. Borodina, V.I. Smirnov, I.B. Rozentsveig *Asian J. Org. Chem.*, 2024, e202400017.

ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ НОВЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ И СПИРОЦИКЛИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ ИНДОЛА

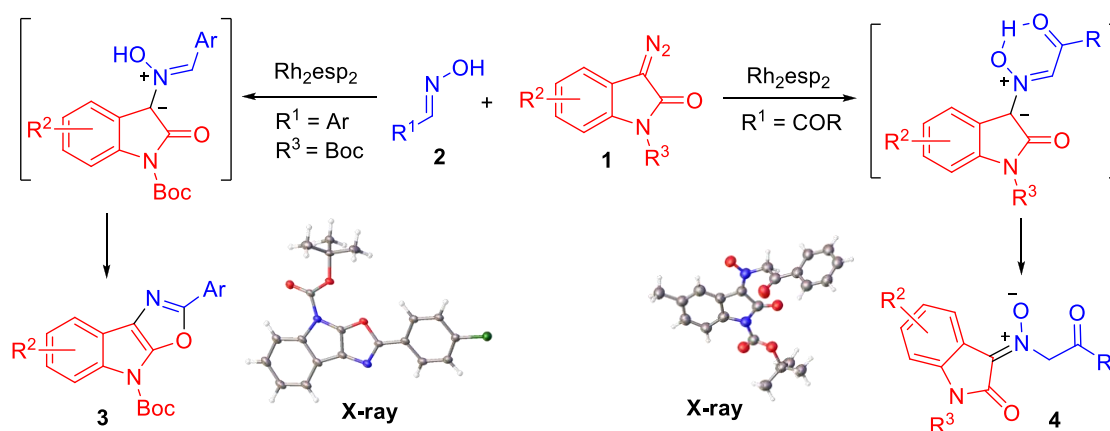
Ростовский Н.В., Антонычев Г.И., Николаева А.А., Титов Г.Д., Филиппов И.П.

Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии
198504, Россия, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр., 26.

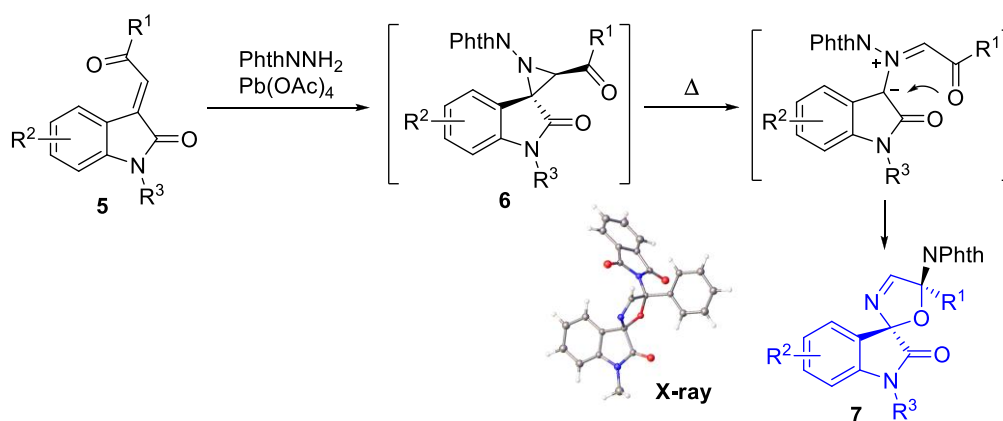
E-mail: n.rostovskiy@spbu.ru

Производные индола являются одними из наиболее важных и востребованных биологически активных гетероциклических соединений.

В первой части данного исследования для синтеза малоизученных производных 4*H*-оксазоло[5,4-*b*]индола была опробована Rh(II)-катализируемая реакция 3-диазоиндолин-2-онов **1** с альдоксимами **2**. Как оказалось, в зависимости от типа альдоксимонов, эти реакции приводят к различным продуктам: в случае бензальдоксимонов образуются 4*H*-оксазоло[5,4-*b*]индолы **3**, а в случае α-кетоальдоксимонов – нитроны **4**, содержащие фрагмент оксиндола.



Во второй части работы обсуждается разрабатываемый новый диастереоселективный подход к 2,5-дигидрооксазол-спирооксиндолам **7**, содержащим фталимидный фармакофор. Синтез основан на превращении ароилметиленоксиндолов **5** в *N*-фталимидазиридины **6**, термолиз которых приводит к циклизации по бензоильной группе, сопровождающейся миграцией фталимидного заместителя.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-73-10184-П), с использование оборудования ресурсных центров СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества» и «Рентгенодифракционные методы исследования».

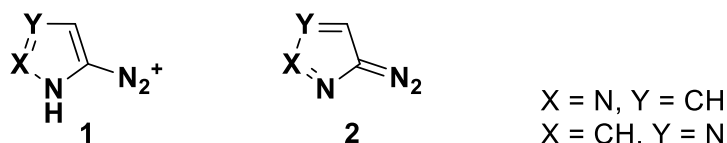
ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ДИАЗОФУНКЦИИ
НА СИНТЕТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ЕЁ СОДЕРЖАЩИХ ДИАЗОЛОВ

Садчикова Е.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
химико-технологический институт, г. Екатеринбург, Россия
e-mail: selena-ekb@rambler.ru

Азолы, содержащие диазофункцию в α -положении к эндоциклическому атому азота, известны с 1890-х годов, когда на основе соответствующих первичных гетариламинов впервые были получены диазотетразол [1] и 3-диазоиндазол [2]. Сегодня с уверенностью можно говорить о том, что продукты диазотирования аминокетолов, в зависимости от условий самого процесса и последующих этапов выделения, могут иметь различную природу [3, 4]. Этот факт весьма привлекателен для химиков-синтетиков, поскольку таит в себе возможности к объединению в химии гетероциклов синтетического потенциала ароматических солей диазония и алифатических диазосоединений [5]. Важно заметить, что реакционная способность объектов данного исследования в значительной степени зависит от взаимного влияния диазофункции и гетероцикла с разнообразными по химической природе заместителями в нем, поскольку последний сам по себе обладает различными свойствами, которые могут быть усилены или нивелированы диазофункцией.

В докладе будут представлены результаты сравнительных исследований синтетического потенциала солей диазония **1** и диазосоединений **2** имидазольного [3] и пиразольного [4] ряда, позволившие в реакциях с аренами [3, 4, 6], активными метиленовыми производными [7, 8], енаминами [9, 10], енаминонами [11], изоцианатами [12] и изотиоцианатами [13, 14] получить широкий ряд разнообразных гетероциклических соединений, а также предложить прогностические критерии для оценки реакционной способности объектов исследования, направленные на повышение эффективности изучаемых типов взаимодействий.



Литература

1. U. Thiel, *Ann.*, 1892, **270**, 46.
2. E. Bamberger, *Ber. Chem.*, 1899, **32** (7), 1773.
3. Е. В. Садчикова, В. С. Мокрушин, *Изв. АН. Сер. хим.*, 2003, **7**, 1516.
4. Д. Л. Алексеева, В. Ю. Рахимова, А. С. Минин, А. В. Белоусова, Е. В. Садчикова, *ХГС*, 2018, **12**, 1145.
5. В. С. Мокрушин, Е. В. Садчикова, *Химия гетероциклических диазосоединений: монография*. – Санкт-Петербург: Проспект Науки, 2013. – 224 с.
6. Е. В. Садчикова, В. С. Мокрушин, *Изв. АН. Серия хим.*, 2006, **7**, 1208.
7. Е. В. Садчикова, В. С. Мокрушин, *ХГС*, 2014, **7**, 1100.
8. А. Х. Хумаири, Д. Л. Сперанский, Е. В. Садчикова, *Хим.-фарм. журнал*, 2022, **56** (6), 31.
9. E. V. Sadchikova, N. E. Safronov, N. A. Beliaev, V. G. Nenajdenko, N. P. Belskaya, *Molecules*, 2023, **28** (7), 3192.
10. E. V. Sadchikova, N. A. Beliaev, N. E. Safronov, D. L. Alexeeva, N. P. Belskaya, *New J. Chem.*, 2022, **46** (46), 22171.
11. E. V. Sadchikova, D. L. Alexeeva, V. G. Nenajdenko, *Mendeleev Commun.*, 2020, **30** (2), 180.
12. Е. В. Садчикова, *Изв. АН. Серия хим.*, 2016, **7**, 1867.
13. E. V. Sadchikova, V. A. Bakulev, Ju. O. Subbotina, D. L. Privalova, W. Dehaen, K. Van Hecke, K. Robeyns, L. Van Meervelt, V. S. Mokrushin, *Tetrahedron*, 2013, **69** (34), 6987.
14. E. V. Sadchikova, V. A. Bakulev, W. Dehaen, K. Van Hecke, K. Robeyns, L. Van Meervelt, V. S. Mokrushin, A. Padwa, *SynLett.*, 2004, **11**, 2037.

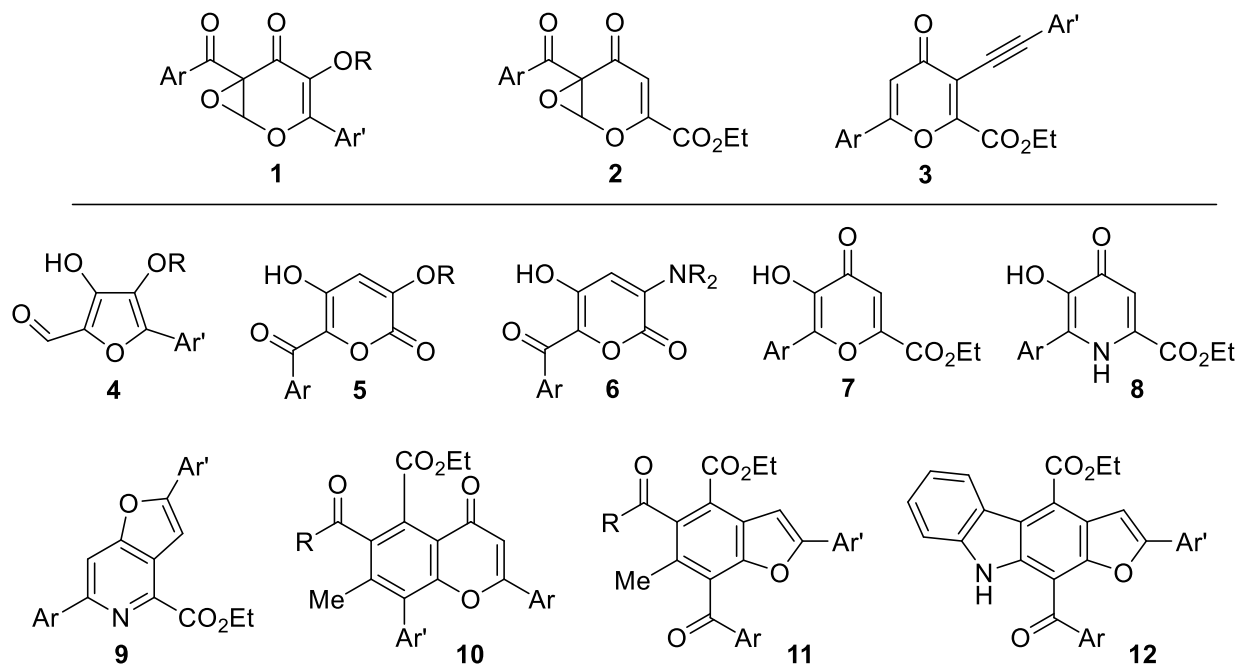
НОВЫЕ ТРАНСФОРМАЦИИ В 4-ПИРОНОВОМ РЯДУ

Сосновских В.Я., Обыденнов Д.Л., Федин В.В., Усачев С.А.

Уральский федеральный университет, ИЕНиМ, Екатеринбург, Россия

e-mail: vy.sosnovskikh@urfu.ru

Исследованы новые трансформации в ряду замещенных 4-пиронов **1–3**. Показано, что из эпоксипиронов **1** могут быть получены фурфуролы **4**, а из эпоксипиронов **2** – 3-алкокси/алкиламино-2-пироны **5** и **6**, 3-гидрокси-4-пироны **7** и 3-гидрокси-4-пиридоны **8**. На основе 3-алкинил-4-пиронов **3** разработаны методы синтеза фуро[3,2-с]пиридинов **9**, флавонов **10**, кумаронов **11** и фуро[2,3-*b*]карбазолов **12**. В докладе будут рассмотрены условия проведения реакций и механизмы изученных превращений [1–3].

*Литература*

1. E.V. Steparuk, E.A. Meshcheryakova, V.V. Viktorova, M.V. Ulitko, D.L. Obydenov, V.Y. Sosnovskikh *J. Org. Chem.*, 2023, **88**, 11590.
2. V.V. Fedin, S.A. Usachev, D.L. Obydenov, V.Y. Sosnovskikh *Asian J. Org. Chem.*, 2025, **14**, e202500149.
3. P.K. Titova, N.A. Alikin, A.V. Kaurova, V.V. Viktorova, A.E. Simbirtseva, E.V. Steparuk, O.S. Eltsov, D.L. Obydenov, V.Y. Sosnovskikh *Synthesis*, 2025, DOI 10.1055/a-2623-8823.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 22-73-10236).

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ ПРИВИЛЕГИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ ИЗ N-O-СОЕДИНЕНИЙ

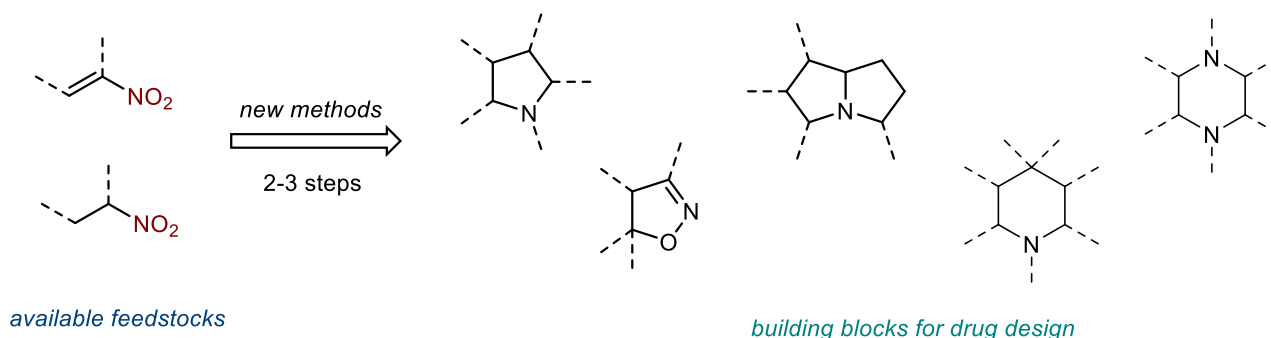
Поспелов Е.В., Ушаков П.Ю., Окладников И.В., Сухорукнов А.Ю.

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия.

e-mail: sukhorukov@ioc.ac.ru

Азотистые гетероциклические соединения входят в структуру большинства синтетических лекарственных препаратов. Более 80% малых молекул, одобренных для медицинского использования за последние десять лет, содержат как минимум один азотистый гетероцикл. При этом в число пяти наиболее часто встречающихся гетероциклических мотивов входят три насыщенных – пирролидин, пиперидин и пиперазин – и только два ароматических (пиридин и пиримидин) [1]. Это объясняется тенденцией к переходу от плоских структур к трёхмерным, содержащим большое количество sp^3 гибридных атомов. Такие фрагменты лучше вписываются в активные сайты биологических мишеней, обеспечивая более эффективное связывание и большую избирательность.

В отличие от ароматических N-гетероциклов, методология синтеза которых хорошо развита с помощью реакций конденсации и пост-модификации кольца, сборка замещенных насыщенных N-гетероциклических каркасов представляет собой более трудную задачу, которая, к тому же, осложняется проблемой диастерео- и энантиоселективности.



В докладе обсуждаются последние достижения нашей лаборатории в области разработки подходов к синтезу ценных гетероциклов на основе каскадных превращений органических азот-кислородных соединений [2–4].

Литература

1. C. M. Marshall, J. G. Federice, C. N. Bell, P. B. Cox, J. T. Njardarson, *J. Med. Chem.*, **2024**, 67, 11622.
2. R. S. Malykhin, S. A. Aksenova, A. Yu. Sukhorukov, *Org. Lett.*, **2024**, 26, 450.
3. E. V. Pospelov, A. V. Zhironov, B. Kamidolla, A. Yu. Sukhorukov, *Adv. Synth. Catal.*, **2023**, 365, 2850.
4. E. V. Pospelov, Y. D. Boyko, S. L. Ioffe, A. Y. Sukhorukov, *Adv. Synth. Catal.*, **2022**, 364, 2557.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 22-13-00230-П).

ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ВЫСОКОСПИНОВЫЕ МОЛЕКУЛЫ

Третьяков Е.В.^а, Заякин И.А.^а, Грицан Н.П.^б, Петунин П.В.^в, Постников П.С.^в,
Федин М.В.^г, Богомяков А.С.^г, Романенко Г.В.^г

^аИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва;

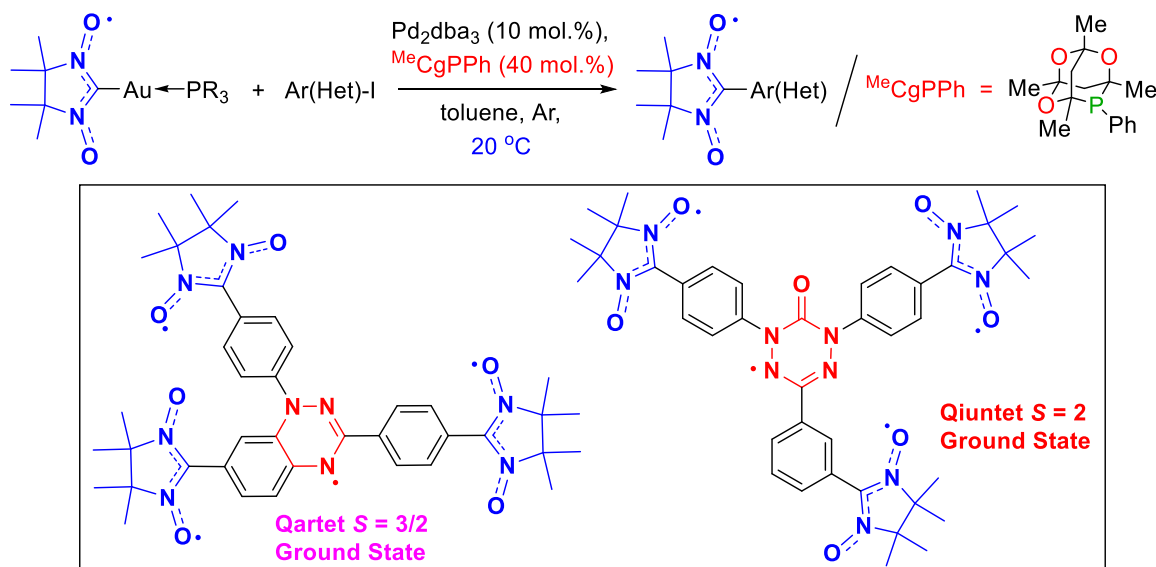
^бИнститут химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН, Новосибирск;

^вТомский политехнический университет, Томск;

^гИнститут «Международный томографический центр» СО РАН, Новосибирск, Россия.

e-mail: tretyakov@ioc.ac.ru

Органические радикалы с высокоспиновым основным состоянием и большим энергетическим зазором между основным и ближайшим возбужденным состоянием перспективны в качестве функциональных магнитно-активных материалов [1]. Нами разработаны реакции кросс-сочетания, позволяющие получать ди-, три- и тетраадикалы, состоящие из оксовердазильных (или триазинильных) и нитронилнитроксильных радикалов, и обладающие триплетным, квартетным и квинтетным основными состояниями [2]. Синтезированные высокоспиновые полирадикалы обладают высокой термической стабильностью; они полностью охарактеризованы методами РСА, СКВИД-магнетометрии, ЭПР-спектроскопии, ЦВА и квантовой химии [3, 4].



Литература

1. E. V. Tretyakov, Preparation and characterization of magnetic and magnetophotonic materials based on organic free radicals. In *Organic Radicals*; C. Wang, A. Labidi, E. Lichtfouse, Eds.; Elsevier, 2024; pp 61–181. <https://doi.org/10.1016/B978-0-443-13346-6.00005-1>.
2. I. Zayakin, E. Tretyakov, A. Akyeva, M. Syroeshkin, Ju. Burykina, A. Dmitrenok, A. Korlyukov, D. Nasyrova, I. Bagryanskaya, D. Stass, V. Ananikov *Chem. Eur. J.*, 2022, e202203118.
3. E. Tretyakov, P. Petunin, S. Zhivetyeva, D. Gorbunov, N. Gritsan, M. Fedin, D. Stass, R. Samoilova, I. Bagryanskaya, I. Shundrina, A. Bogomyakov, M. Kazantsev, P. Postnikov, M. Trusova, V. Ovcharenko *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, **143**, 8164.
4. I. A. Zayakin, P. V. Petunin, P. S. Postnikov, A. A. Dmitriev, N. P. Gritsan, P. Dorovatovskii, A. Korlyukov, M. V. Fedin, A. S. Bogomyakov, A. Ya. Akyeva, R. A. Novikov, P. G. Shangin, M. A. Syroeshkin, J. V. Burykina, E. V. Tretyakov *J. Am. Chem. Soc.*, 2024, **146**, 13666.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-73-20009).

**ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ С-Н ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ ГЕТЕРОАРЕНОВ
В СОЗДАНИИ СОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ ТАРГЕТНОЙ ТЕРАПИИ
НЕЙРОДЕГЕНЕРАТИВНЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ**

**Утепова И.А.^{а,б}, Тресцова М.А.^{а,б}, Чупахин О.Н.^{а,б},
Чарушин В.Н.^{а,б}, Лазарев В.Л.^в, Гужова И.В.^в, Маргулис Б.А.^в**

^аУральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
химико-технологический институт, Екатеринбург, Россия
e-mail: i.a.utepova@urfu.ru

^бФедеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органического синтеза им. И.Я.
Постовского, УрО РАН, Екатеринбург, Россия

^вФедеральное государственное бюджетное учреждение Институт цитологии РАН,
194064, Санкт-Петербург, Тихорецкий просп., д. 4

В последние десятилетия достигнуты весомые результаты в области прямых окислительных функционализаций С-Н связи в гетероаренах. Интерес к этим превращениям вызван высокой атомной экономией процессов, а также практической значимостью би(гетеро)ариллов для различных областей химии. Для окислительной С-Н функционализации азинов (гетеро)ароматическими нуклеофилами нами была успешно применена гетерофазная фотокаталитическая система O₂ воздуха / катализатор TiO₂ / облучение светом (схема 1).

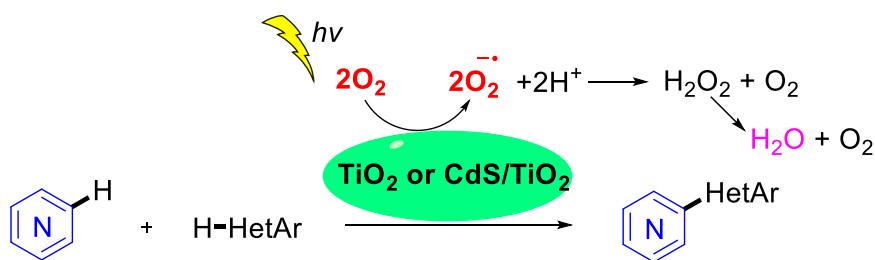


Схема 1. Окислительная С-Н функционализация азинов

Молекулярные шапероны, в частности белки теплового шока Hsp70, Hsp90 и другие, являются одним из элементов защиты клетки от стрессовых и патогенных факторов. С возрастом активность шаперонов снижается, что зачастую, может являться одной из причин корреляции нейродегенеративных заболеваний со старением. Индукторы экспрессии шаперона могут стать потенциальными лекарственными препаратами для борьбы с этими тяжелыми заболеваниями. Было установлено, что полученные соединения проявляют Hsp70-индуцирующие свойства. Синтезированные производные были апробированы в моделях болезни Альцгеймера и вторичных повреждений после черепно-мозговой травмы. В обоих случаях они продемонстрировали значимый терапевтический эффект, повышая выживаемость нейрональных клеток при крайне низком уровне токсичности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00298-П).

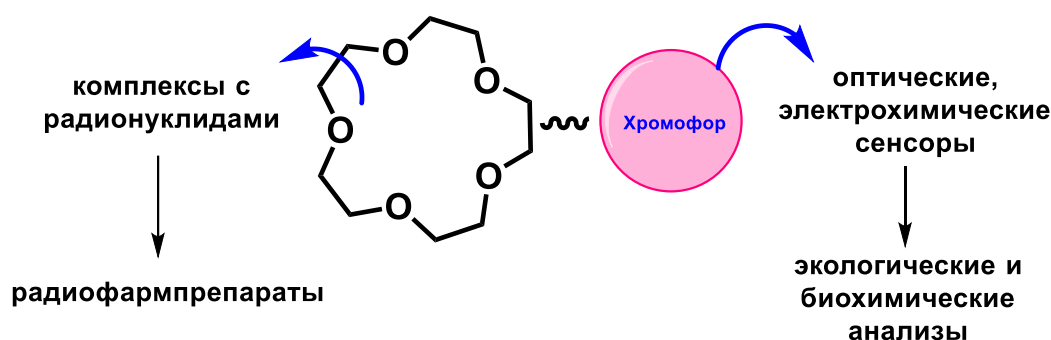
КРАУН-СОЕДИНЕНИЯ КАК ОСНОВА ДЛЯ СОЗДАНИЯ НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ

**Федоров Ю.В., Зубенко А.Д., Панченко П.А., Устимова М.А.,
Токарев С.Д., Федорова О.А.**

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук, Москва, Россия
119334, Россия, г. Москва, ул. Вавилова, д. 28.*

fedorov@ineos.ac.ru

Краун-соединения способны связывать катионы металлов различной природы, что обуславливает их применение в качестве катион-связывающих фрагментов в различных функциональных системах. В настоящем докладе представлены исследования, демонстрирующие области применения краун-эфиров при сочетании их с хромофорными фрагментами различной природы. Так, введение в состав макроциклических соединений подходящих хелатирующих групп приводит к получению хелаторов для радионуклидов, которые могут быть введены в состав радиофармпрепаратов.



Сочетание краун-соединений с хромофорными фрагментами ведет к оптическим сенсорам. Оптические сенсорные системы находят применение в качестве компонент сенсорных материалов для мониторинга окружающей среды. Комбинация краун-соединений и электрохимически активных фрагментов позволяет получить новые ион-селективные электродовы. Флуоресцентные сенсоры на биогенные катионы металлов используются для анализа катионов в клеточной среде. Во всех видах аналитических устройств селективность определяется составом и размером макроциклического фрагмента.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №23-13-00424).

ФОТОИНДУЦИРУЕМАЯ *IN SITU* ГЕНЕРАЦИЯ ДНК-ТАРГЕТНЫХ
И ДНК-РАЗРУШАЮЩИХ АГЕНТОВ

**Федорова О.А.,¹ Гулакова Е. Н.,¹ Перевозчикова П. С.,¹ Сайфутярова А.Э.,¹
Имелс Х.,² Федоров Ю. В.¹**

^aИнститут элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук, 119991,
Москва, Вавилова 28,

^bФакультет химии и биологии Университета г. Зигена, Германия
[e-mail: fedorova@ineos.ac.ru](mailto:fedorova@ineos.ac.ru)

В настоящем докладе описывается простой и эффективный фотохимический метод получения поликонденсированных гетероароматических соединений. Метод позволяет синтезировать труднодоступные гетероароматические производные облучением водных растворов стиролов полным или фильтрованным светом при времени облучения от нескольких минут до нескольких часов. Реакция протекает региоселективно, образование гетероароматических производных происходит с хорошими и высокими выходами.

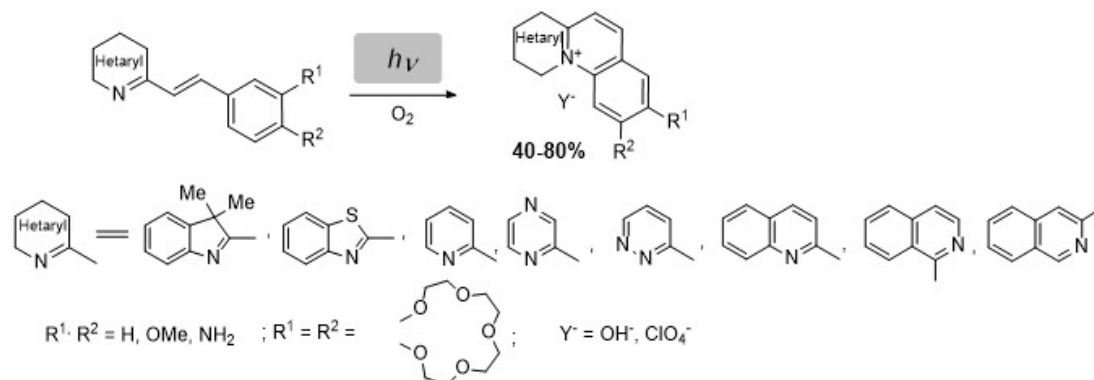
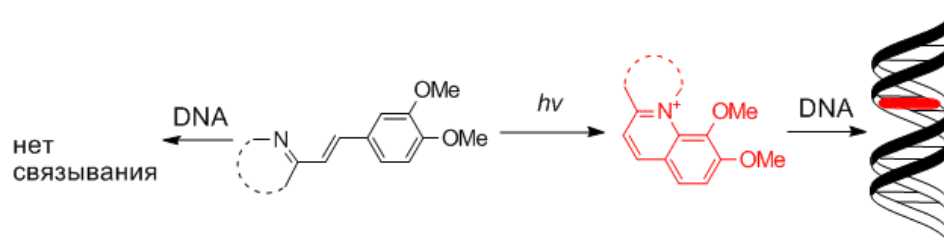


Схема фотоиндуцированной электроциклической реакции

На основе этой реакции мы развили подход к созданию *in situ* ДНК-интеркалятора. Исходные соединения - стирилзамещенные основания связываются слабо с ДНК. Напротив, фотопродукты связываются с высокой аффинностью ($K_b \approx 10^5 \text{ M}^{-1}$) с ДНК. Наиболее важно, что фотоциклизация субстратов проводилась непосредственно в ДНК-содержащем растворе без значительного повреждения ДНК в условиях реакции. Продукты фотоциклизации в зависимости от структуры демонстрируют селективную цитотоксичность к определенным типам раковых клеток, проявляют свойства фотосенсибилизаторов для ФДТ. На основе разработанных электроциклов удалось получить низкомолекулярные молекулы-ингибиторы, которые нацелены на изменение эпигенома рака, т.е. селективно связываются с метилированной ДНК в присутствии неповрежденной ДНК.



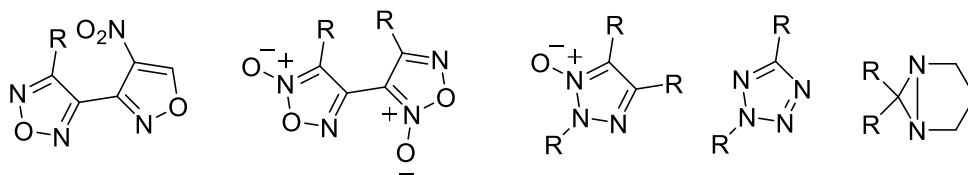
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 21-73-20158-П.

НОВЫЕ ТОЧКИ РОСТА В ХИМИИ ПОЛИАЗОТНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Ферштат Л.Л.Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,
Москва, Россия.e-mail: fershtat@bk.ru

Азотсодержащие гетероциклы относятся к незаменимым классам органических соединений, которые связывают все аспекты жизни человека и функционирования биосферы. По сравнению с широко известными производными пиррола и пиридина, которые известны многим еще в рамках школьной программы, гетероциклы с высоким содержанием азота распространены значительно меньше. Однако тенденции последних лет указывают на высокую значимость полиазотных гетероциклов для получения нового поколения функциональных материалов, лекарственных препаратов, агрохимикатов или других важных продуктов химической промышленности [1-4].

В настоящем докладе будут представлены последние достижения лаборатории азотсодержащих соединений ИОХ РАН в разработке методологии конструирования различных гетероциклических структур с высоким содержанием азота [5-11]. В последние годы нам удалось развить как традиционные подходы к сборке гетероциклических ансамблей на основе оксадиазола, так и создать электрохимические методы внутримолекулярного образования N-N связи для выхода к производным триазола и его мезоионным структурам. Кроме того, в докладе будет отражена разработка оптимизированного метода синтеза бициклических диазиридинов – 1,5-диазабицикло[3.1.0]гексанов как важных предшественников в сборке сложных азотсодержащих гетероциклических систем.

**Литература**

1. D.B. Vinogradov, L.L. Fershtat *Chem. Eng. J.*, 2025, **504**, 158859.
2. K. Titenkova, D.A. Chaplygin, L.L. Fershtat *ChemElectroChem*, 2024, **11**, e202400395.
3. N.V. Muravyev, L.L. Fershtat, Q. Zhang *Chem. Eng. J.*, 2024, **486**, 150410.
4. A.B. Шаферов, Л.Л. Ферштат *Успехи химии*, 2024, **93**, RCR5109.
5. E.E. Vinogradova, L.L. Fershtat *Org. Lett.*, 2025, **27**, 5686-5690.
6. V.A. Sereda, E.V. Dubasova, I.V. Ananyev, E.K. Kosareva, L.L. Fershtat *Dalton Trans.*, 2025, **54**, 8870-8880.
7. K. Titenkova, E. A. Turpakov, D. A. Chaplygin, L. L. Fershtat *Org. Lett.*, 2025, **27**, 4434-4438.
8. A.A. Konnov, A.D. Lisyutkin, D.B. Vinogradov, A.A. Nazarova, A.N. Pivkina, L.L. Fershtat *Org. Lett.*, 2025, **27**, 3795-3799.
9. I.D. Deltsov, D.B. Vinogradov, K.A. Monogarov, L.L. Fershtat *J. Org. Chem.*, 2025, **90**, 733-741.
10. A.D. Shuvaev, M.A. Feoktistov, F.E. Teslenko, L.L. Fershtat *Adv. Synth. Catal.*, 2024, **366**, 5050-5060.
11. Yu.A. Sidunets, V.G. Melekhina, L.L. Fershtat *Beilstein J. Org. Chem.*, 2024, **20**, 2342-2348.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 24-73-10151).

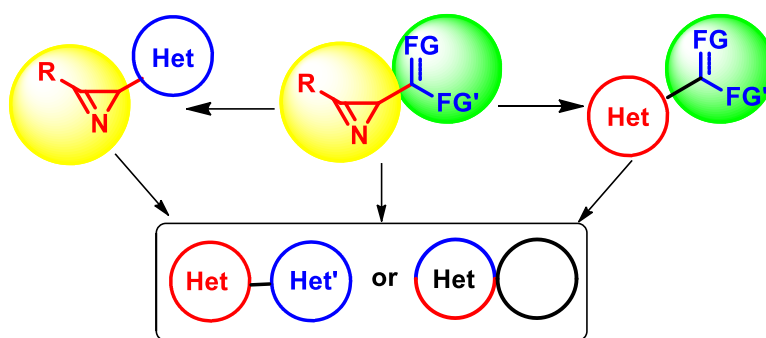
ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫЕ АЗИРИНЫ - БИНАРНЫЕ СИНТЕТИЧЕСКИЕ БЛОКИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ (ПОЛИ)ГЕТЕРОЦИКЛОВ И ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ ГИБРИДОВ

Хлебников А.Ф.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

a.khlebnikov@spbu.ru

Бинарные синтетические блоки (БСБ) на основе функционализированных азиринов являются основой эффективной синтетической стратегии получения (поли)гетероциклов и гетероциклических гибридов. Сочетание напряжения малого кольца, электрофильности напряженного имида и нуклеофильности неподеленной пары азота проявляется в уникальной реакционной способности 2*H*-азиринов, позволяющей их использовать для синтеза разнообразных азолов и азинов. Вторым компонентом таких БСБ является активная функциональная группа (ФГ), на основе которой может формироваться второй гетероциклический фрагмент (при синтезе гетероциклических гибридов) или новый гетероцикл путем осуществления разнообразных внутримолекулярных циклизаций (при синтезе (поли)гетероциклов).



Синтез и использование домино- и ортогональных реакций новых функционализированных азиринов как основы для разработки новых методов получения гетероциклов и гетероциклических гибридов проиллюстрированы результатами исследований, проведенных в Институте химии Санкт-Петербургского государственного университета.

Литература

- [1] Galenko E.E. et al. *J. Org. Chem.* **2025**, 90, 3334.
- [2] Zanakhov T.O. et al. *J. Org. Chem.* **2024**, 89, 8641.
- [3] Galenko E.E. et al. *Molecules* **2024**, 29, 1538.
- [4] Prokop'eva I.N. et al. *Tetrahedron*, **2024**, 167, 134255.
- [5] Zanakhov T.O. et al. *J. Org. Chem.* **2023**, 88, 13191.
- [6] Agafonova A.V. et al. *Molecules* **2023**, 28, 275.
- [7] Zanakhov T.O. et al. *J. Org. Chem.* **2022**, 87, 15598.
- [8] Krivolapova Yu. V. et al. *Org. Biomol. Chem.* **2022**, 20, 5434.
- [9] Zanakhov T.O. et al. *Molecules* **2021**, 26, 1881.
- [10] Galenko E.E. et al. *J. Org. Chem.* **2021**, 86, 4098.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 25-13-00057).

РЕАКЦИИ БИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СЕЛЕНИЛЬНЫХ РЕАГЕНТОВ С НЕНАСЫЩЕННЫМИ СУБСТРАТАМИ

Цховребов А.Г.*Российский университет дружбы народов, Москва, Российская Федерация*

Активация малых молекул представляет собой важнейшее научно-технологическое направление. Эффективное решение этих проблем позволит создать экономику будущего, где CO_2 превращается в ценное сырье для топлива и полимеров. Где вездесущий, но инертный азот легко преобразуется в аммиак без гигантских энергозатрат процесса Габера-Боша. Где метан становится источником сложных органических соединений, а не просто сжигается в факелах. Это не фантастика – это возможное будущее, которое создается уже сегодня в лабораториях по всему миру.

Превращения малых молекул потенциально будут лежать в основе химической промышленности будущего (Tolman, *Inorg. Chem.*, 2015, 54, 5039). В течение 20 века активация малых молекул осуществлялась преимущественно с участием переходных металлов. Разработанные на их основе системы совершили революцию, кардинально преобразовав химическую промышленность и оказав заметное влияние на развитие современной цивилизации. Однако, несмотря на впечатляющие успехи, катализ с участием переходных металлов имеет ряд ограничений: высокая стоимость некоторых металлов, их дефицитность и пр. Актуальность поиска альтернативных подходов подчеркивается стремительным развитием органокатализа, получившего в 2021 году высочайшее признание — Нобелевскую премию по химии, что свидетельствует о растущем интересе научного сообщества к разработке новых, более эффективных методов активации малых молекул. В 2006 году зародилось новое направление – использование концепции рыхлых пар Льюиса для активации различных малых молекул. Было установлено, что эти системы способны активировать даже крайне инертные молекулы, включая N_2O и CO_2 .

В данном докладе будет освещено исследование бифункциональных халькогенсодержащих систем для активации малых молекул и ненасыщенных соединений. Будет показано, что 2-пиридилселенильные реагенты образуют циклические аддукты даже с неактивированными нитрилами. Это особенно значимо, поскольку классические рыхлые пары Льюиса не способны активировать инертную тройную связь $\text{C}\equiv\text{N}$ в нитрилах, что подчеркивает уникальность разрабатываемых нами систем. Было проведено исследование реакционной способности селенильных реагентов по отношению к ненасыщенным субстратам помимо нитрилов, включая изоцианаты, изотио- и изоселеноцианаты, а также координированные изоцианиды. Была впервые продемонстрирована обратимость присоединения селенильных реагентов к ряду субстратов, что важно для развития каталитических применений. Также будет показано, что некоторые соединения обладают значительным прикладным потенциалом. В частности, производные 1,2-диселеназолов (аддукты селенильных реагентов и изоселеноцианатов), проявляют высокую фунгицидную активность и даже превышают активность некоторых коммерческих фунгицидов.

Литература

- 1) Meyer, Tolman, *Forums on Small-Molecule Activation, Inorg. Chem.*, 2015, 54, 5039.
- 2) Stephan et. al. Reversible, Metal-Free Hydrogen Activation, *Science*, 2006, 314, 1124.
- 3) a) Khrustalev, V. N.; Grishina, M. M.; Matsulevich, Z. V.; Lukiyanova, J. M.; Borisova, G. N.; Osmanov, V. K.; Novikov, A. S.; Kirichuk, A. A.; Borisov, A. V.; Solari, E.; Tskhovrebov, A. G. *Dalton Trans.* 2021, 50, 10689. b) Grudova, M. V.; Khrustalev, V.N.; Kubasov, A.S.; Strashnov, P. V.; Matsulevich, Z. V.; Lukiyanova, J.M.; Borisova, G.N.; Kritchenkov, A.S.; Grishina, M.M.; Artemjev, A.A.; et al. *Cryst. Growth Des.* 2022, 22, 313. c) Artemjev, A.A.; Novikov, A.P.; Burkin, G.M.; Sapronov, A.A.; Kubasov, A.S.; Nenajdenko, V.G.; Khrustalev, V.N.; Borisov, A. V.; Kirichuk, A.A.; Kritchenkov, A.S.; et al.. *Int. J. Mol. Sci.* 2022, 23, 6372. d) Sapronov, A.A.; Artemjev, A.A.; Burkin, G.M.; Khrustalev, V.N.; Kubasov, A.S.; Nenajdenko, V.G.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Kritchenkov, A.S.; Tskhovrebov, A.G. *Int. J. Mol. Sci.* 2022, 23, 14973. e) Artemjev, A.A.; Kubasov, A.S.; Kuznetsov, M.L.; Grudova, M. V.; Khrustalev, V.N.; Kritchenkov, A.S.; Tskhovrebov, A.G. *CrystEngComm* 2023, 25, 3691. f) A.A. Sapronov, V.N. Khrustalev, O.G. Chusova, A.S. Kubasov, A.S. Kritchenkov, V.G. Nenajdenko, A.G. Tskhovrebov. *Inorg. Chem.* 2024, 63, 13924.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (22-73-10007-П).

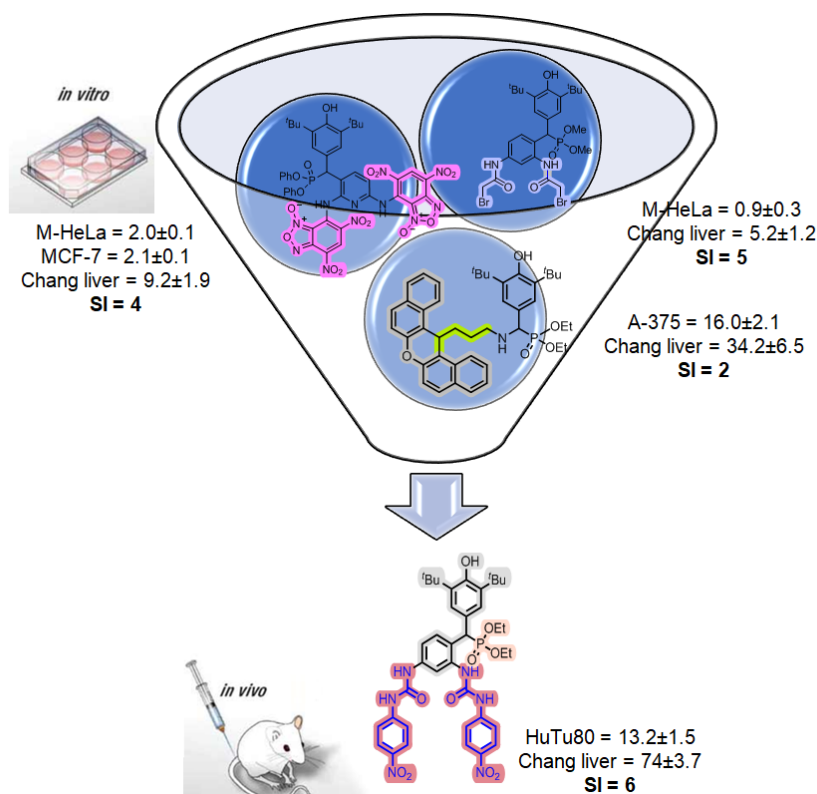
КОНСТРУИРОВАНИЕ РЕДОКС-AКТИВНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ В КАЧЕСТВЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ И АНТИМИКРОБНЫХ ПРЕПАРАТОВ

Чугунова Е.А.^а, Гибадуллина Э.М.^а, Газизов А.С.^а, Смолобочкин А.В.^а, Неганова М.Е.^{а,б}, Волошина А.Д.^а, Богданов А.В.^а, Бурилов А.Р.^а, Алабугин И.В.^а

^аИнститут ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия,

^бИнститут элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова, Москва, Россия,
e-mail: chugunova.e.a@gmail.com

В настоящее время основными проблемами при терапии онкологических заболеваний и бактериальных инфекций являются отсутствие избирательности действия и высокая токсичность цитостатиков, вызывающих тяжелые побочные реакции, а также растущая резистентность микроорганизмов к антибиотикам вследствие их нерационального использования. В связи с этим нами разработан подход к дизайну потенциальных лекарственных кандидатов противоопухолевой и антимикробной фармакологической направленности, заключающийся в использовании модифицированной концепции пролекарств, формировании предпосылок к таргетному действию и объединению в одной молекуле нескольких фармакофорных фрагментов. Осуществлен масштабный синтез целевых полифармакофорных соединений, содержащих пространственно-затрудненный фенол, которые в нормальных условиях при нейтральном pH обладают антиоксидантной активностью и способны защищать здоровое микроокружение от окислительного стресса, а в условиях закисления среды, которое наблюдается в опухолях, способны метаболizироваться в высокотоксичные формы и приводить к гибели опухолевых клеток.



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда №25-73-31002, <https://rscf.ru/project/25-73-31002/>.

КАК УМЕНЬШИТЬ ЗАГРУЗКУ КАТАЛИЗАТОРА?

**Чусов Д.А., Афанасьев О.И., Ключев Ф.С., Бирюков К.О., Подъячева Е.С.,
Фаткулин А.Р., Козлов А.С., Смирнов И.В., Лосев М.А., Балалаева А.И.**

*Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН),
119334, Россия, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1.
e-mail: Denis.chusov@gmail.com*

Катализ играет ключевую роль в современной химии как в фундаментальных исследованиях, так и в прикладных. Поэтому разработка активных и селективных каталитических систем является важным направлением. В рамках данной работы будут обсуждены варианты как уменьшить загрузки катализатора.

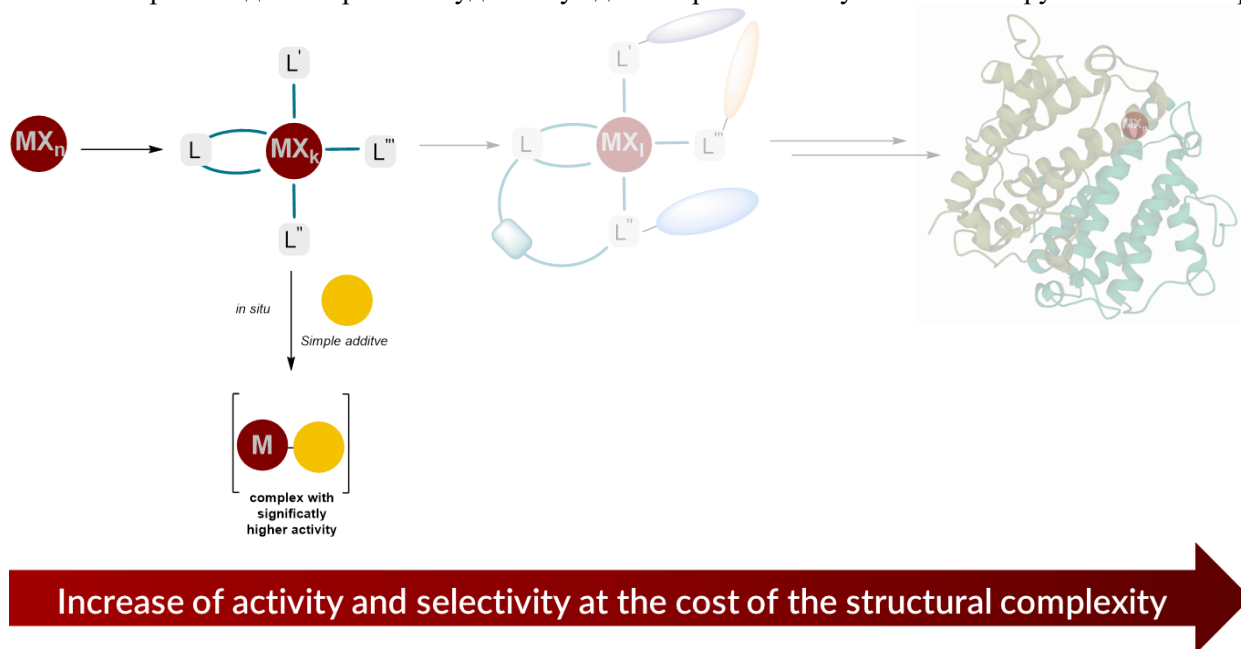


Рис. 1. Развитие структуры катализаторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-43-00096).

СОЕДИНЕНИЯ ГИПЕРВАЛЕНТНОГО ЙОДА: ПОЛУЧЕНИЕ СТРУКТУРА И ПРИМЕНЕНИЕ

Юсубов М.С., Постников П.С., Солдатова Н.С.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050, Томск, Ленина 30,
yusubov@tpu.ru*

Соединения гипервалентного йода нашли широкое применение в современной органической химии в качестве реагентов и катализаторов^{1,2}. Реагенты гипервалентного йода на основе гетероциклического бензоиодоксола обладают более высокой стабильностью по сравнению с их ациклическими аналогами, что открывает больше возможностей синтеза и безопасного использования реагентов со функциональными лигандами, такими как N3-, CN- и CF3-группы^{3,4}. Обобщено современное состояние химии гипервалентного йода и представлены наши последние результаты по разработке двух уникальных реагентов гипервалентного йода, чья реакционная способность не может сравниться ни с одним другим обычным реагентом на основе не-йода^{1,2}. В частности, арилбензиодоксаборолы³ являются уникальными бензиновыми предшественниками на основе йода(III), которые легко генерируют ариновые промежуточные продукты при обработке водой при комнатной температуре,⁵ а дитрифлат бензиодоксола йода(V) является самым мощным окислителем, который может быть использован для селективного окисления органических молекул, которые обладают высокой устойчивостью к любым другим окислителям⁶.

Литература

1. Yoshimura A., Zhdankin V. V., *Chem. Rev.* **2024**, 124, 11108.
2. Чарушин В.Н., Вербицкий Е.В., Чупахин О.Н. и др. *Успехи химии*, 2024, **93**, RCR5125
3. V. V. Zhdankin, *Adv. Heterocycl. Chem.* 2015, 115, 1-91.
4. Y. Li, D. P. Hari, M. V. Vita, J. Waser, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, 55, 4436–4454; *Angew. Chem.* 2016, 128, 4512–4531
5. Yoshimura A., Ngo K., Mironova I. A., Gardner Z. S., Rohde G. T., Ogura N., Ueki A., Yusubov M. S., Saito A., Zhdankin V. V., *Org. Lett.* **2024**, 26, 1891.
6. Yusubov M. S., Soldatova N. S., Postnikov P. S., Valiev R. R., Yoshimura A., Wirth T., Nemykin V. N., Zhdankin V. V., *Chem. Commun.* **2019**, 55, 7760.

Работа выполняется при финансовой поддержке гранта РНФ (№ 21-73-20031-н).



УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

РАЗРАБОТКА ХЕМОСЕНСОРНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Абиева Ф.А., Малясова А.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет,

г. Иваново, Россия

E-mail: nice.abieva@list.ru

Фталонитрилы и фталоцианины благодаря своим уникальным свойствам обладают обширной областью применения. Наибольший интерес вызывает изучение их спектральных свойств, которые являются основным фактором для создания хемосенсорных материалов для анализа pH сред в различных областях промышленности.

Рассматриваемые в данной работе диазенилпроизводные фталонитрилов и фталоцианины, полученные на их основе [1-2] (см. структурные формулы и обозначения на рис. 1), обладают повышенной чувствительностью к сильно-щелочным водным средам, что выражается резким изменением окраски растворов в диапазоне pH 7-13, что делает возможным их потенциальное использование в качестве высокочувствительных pH сенсоров среды.

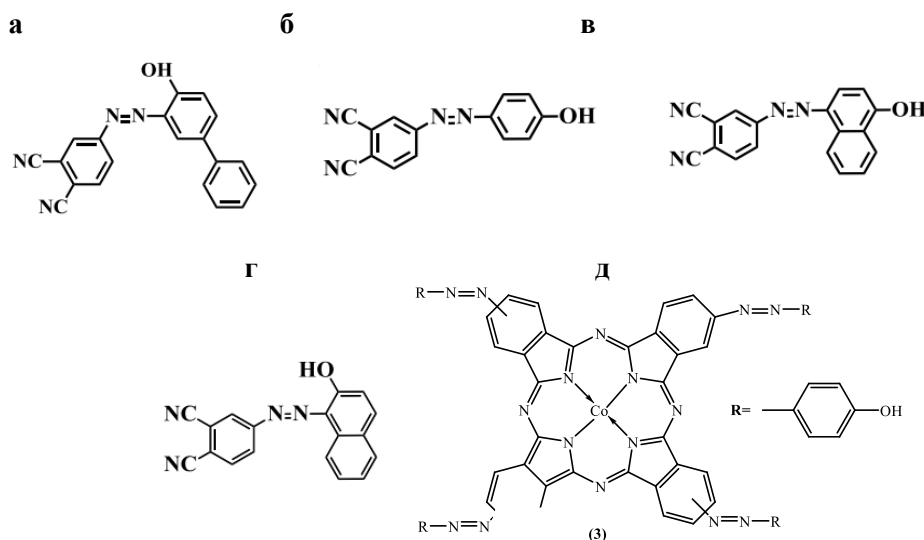


Рис. 1. Структуры изученных фталонитрилов .. фталоцианината кобальта (II): а) 4-[(Z)-(4-гидрокси[1,1'-бифенил]-3-ил)дiazенил]фталонитрила; б) 4-[(E)-(4'-гидроксифенил)дiazенил]фталонитрил; в) 4-[(Z)-(4-гидрокси-1-нафтил)дiazенил]фталонитрила; г) 4-[(Z)-(2-гидрокси-1-нафтил)дiazенил]фталонитрил; д) тетра-4-[(E)-(4'-гидроксифенил)дiazенил]фталоцианинат кобальта (II).

Литература

1. Han, M. Azo-coupled zinc phthalocyanines: Towards broad absorption and application in dye-sensitized solar cells / M. Han, X. Zhang, X. Zhang et al. // Polyhedron. – 2015. – V. 85. – P. 864–873.
2. Тихомирова, Т.В. Синтез и свойства металлофталоцианинов, содержащих в своем составе азохромофоры / Т.В. Тихомирова, С.А. Знойко, Г.П. Шапошников // Журнал общей химии. – 2018. – Т. 88. – № 6. – С. 984-991.

КООРДИНАЦИОННАЯ ХИМИЯ ФЕНАНТРОЛИНДИАМИДОВ: ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ С НИТРАТАМИ РЗЭ

Авакян Н.А.^а, Зонов Р.В.^а, Лемпорт П.С.^а, Тайдаков И.В.^б, Ненайденко В.Г.^а

^аМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия.

^б Физический институт имени П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия.

e-mail: nane.avakyan@mail.ru

Диамиды 1,10-фенантролин-2,9-дикарбоновой кислоты (DAPhen) представляют собой важный класс *N,N',O,O'*-тетраденатных лигандов для высокоэффективного связывания и селективного извлечения *f*-элементов из отработавшего ядерного топлива [1]. Варьирование структуры амидных заместителей, а также введение заместителей в различные положения фенантролинового остова позволяет адаптировать свойства таких лигандов к требованиям конкретной задачи. Так, например, комплексные соединения DAPhen с солями *f*-элементов могут обладать ценными фотофизическими свойствами, которые во многом зависят от особенностей строения исходного лиганда. [2]

Нами были синтезированы комплексные соединения DAPhen с тринитратами некоторых РЗЭ, в том числе европия, гадолиния и тербия. Строение лигандов и их комплексных соединений с нитратами РЗЭ было детально изучено нами с применением спектроскопических методов и рентгеноструктурного анализа (рисунок 1).

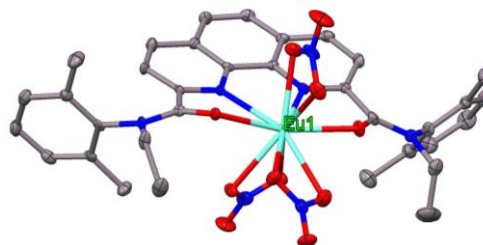
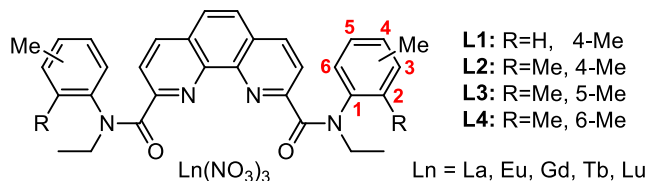


Рис.1. Структурные формулы лигандов L1-L4 и PCA-структура комплекса L4·Eu(NO₃)₃

Нами были изучены и продемонстрированы ценные фотофизические свойства комплексов DAPhen. Было показано, что на фотофизические свойства оказывают существенное влияние как заместители при амидных атомах азота, так и функциональные группы в 4 и 7 положениях гетероциклического остова. Например, присутствие *n*-бутильных групп в амидной функции приводит к значительному увеличению квантовых выходов люминесценции их комплексов по сравнению с аналогичными комплексами алкил-арил-замещенных DAPhen (рисунок 2).

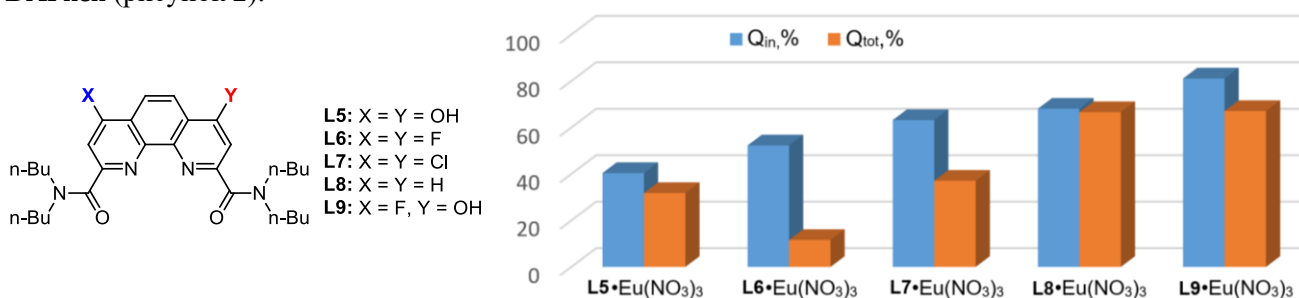


Рис.2. Структурные формулы лигандов L5-L9 и квантовые выходы для L·Eu(NO₃)₃

Выявленные закономерности «структура лиганда в комплексе – фотофизические свойства комплекса» объяснены с привлечением теоретического моделирования и экспериментальных методов, что позволяет осуществлять осмысленный химический дизайн новых лигандов.

Литература

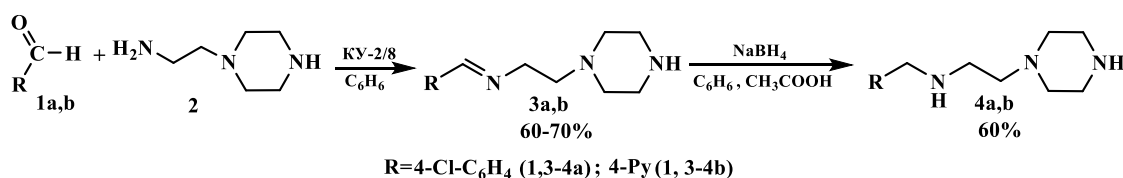
1. S. V. Gutorova, et al. *Russian Journal of General Chemistry*, 2025, **94**(2), 243.
2. N. A. Avagyan, et al. *Rare Metals*, 2025, **44**, 4279.

СИНТЕЗ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ НЕСИММЕТРИЧНЫХ ВТОРИЧНЫХ АМИНОВ

Акимова Е.С.,¹ Уразбаев М.А.,² Султанова Р.М.¹¹ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет»,
450064, Уфа, ул. Космонавтов, 1²ФГБОУ ВО «Башкирский государственный медицинский университет» Минздрава России,
450008, Уфа, ул. Ленина, 3
E-mail: elizaveta_a@mail.ru

Производные иминов, обладающие биологической активностью, проявляют широкий спектр эффектов: от противоэпилептического и антидепрессивного до противовоспалительных, антиагрегантных и антибактериальных эффектов [1,2]. Такие же биологические свойства обнаруживаются и у восстановленных форм.

Конденсацией ароматических альдегидов **1a-b** с 2-(пиперазин-1-ил)этан-1-амином **2** в бензоле, в присутствии катализатора при температуре 80°C были получены имины **3a,b** с выходами 60-70%. Дальнейшее восстановление соединений **3a,b** проводилось NaBH₄-CH₃COOH при пониженной температуре в бензоле (рис.1). Идентификация и структурное подтверждение соединений **3-4a,b** были выполнены ЯМР спектроскопией (¹H и ¹³C).

Рисунок 1. Синтез соединений **3-4a,b**

Для определения наличия потенциальной биологической активности у полученных соединений был проведен прогноз в программе PASS-online, который показал возможное наличие антибактериальной активности [3]. Для выявления потенциальной биологической активности синтезированных соединений был проведен молекулярный докинг. Расчеты проводились с белком штамма *E.Coli*.

В таблице 1 представлены расчетные значения константы ингибирования (K_i) по данным докинга соединений **3-4a,b**. Относительно высокие значения говорят о возможном наличии биологической активности.

Таблица 1. Расчетные значения K_i

№	Соединение	Значение K _i , моль
1.	3a	10,23
2.	3b	8,64
3.	4a	6,16
4.	4b	12,11

Литература

1. Senthil Kumar Raju, Archana Settu, Archana Thiyagarajan, Divya Rama, Praveen Sekar, Shridharshini Kumar. GSC Biol. Pharm. Sci, 2022, 21, 3, 203–215.
2. Katsuki, T. Coordination Chemistry Reviews, 1995, 140, 189–214.
3. URL: <http://www.pharmaexpert.ru/> (дата обращения: 14.04.2025).

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR — 2025-0001 «Нефтехимические реагенты, добавки и материалы».

АЦИЛИРОВАНИЕ С-АЛКИЛЗАМЕЩЁННЫХ АЗАМАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ КАК НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА С- И N-АЦИЛЗАМЕЩЁННЫХ ДИАЗЕПИНОВ, ДИАЗОНИНОВ И ДИАЗАЦИКЛОУНДЕКАНОВ

Михайлов В.В.^a, Анисимова Н.А.^{a,b}

^aРГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург

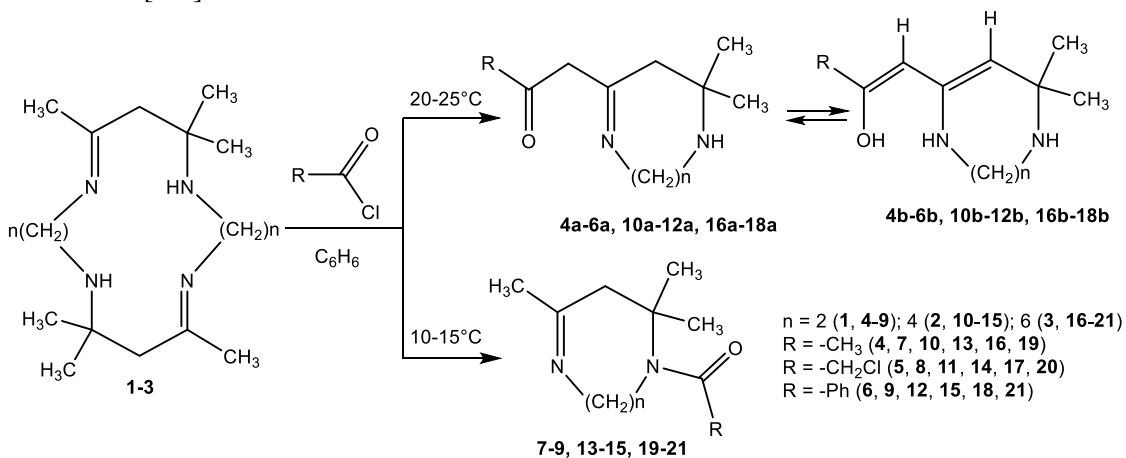
^bСПбГУПТД, Санкт-Петербург

valeriy-mikhailov@yandex.ru

Интерес к химии азамacroциклических соединений обусловлен их распространением в природе (являются фрагментом циклического каркаса *гемоглобина*, *хлорофилла*, *витамина B₁₂*), важностью выполняемых ими функций и широким спектром практического использования от роли ионофоров до лекарственных препаратов (действующий лекарственный препарат *Плериксафор* для лечения онкологических заболеваний).

Целью настоящей работы является изучение реакций ацилирования свободных 14-ти, 18-ти и 22-х членных азамacroциклических соединений, которые были получены нами впервые в 2015 г [1,2] и поэтому их химические свойства до настоящего времени вообще не изучались. Они являются перспективными и доступными прекурсорами, содержащими несколько реакционных центров: амино-, метильную, азометиновую группы и свободную полость.

Взаимодействие азамacroциклов **1-3** с галогенангидридами карбоновых (уксусной, хлоруксусной, бензойной) кислот осуществлялось в растворе бензола в течение 5-6 ч и сопровождалось ацилированием по двум реакционным центрам амино- или активированной метильной группе с последующим гидролитическим расщеплением кратной связи C=N и образованием соответствующих представителей С- и N-ацилированных diazepинов **4-9**, diaзонинов **10-15** и diaзациклоундеканов **16-21**. Отметим, что в зависимости от температуры 20-25 и 10-15°C получались С- или N-ацилированные азотсодержащие циклы **4-6**, **10-12**, **16-18** или **7-9**, **13-15**, **19-21** соответственно [3-5].



Исследуемая нами реакция ацилирования азамacroциклов **1-3** может быть предложена как эффективный и доступный метод синтеза потенциально биологически активных diazepинов, diaзонинов и diaзациклоундеканов труднодоступных другими путями.

Литература:

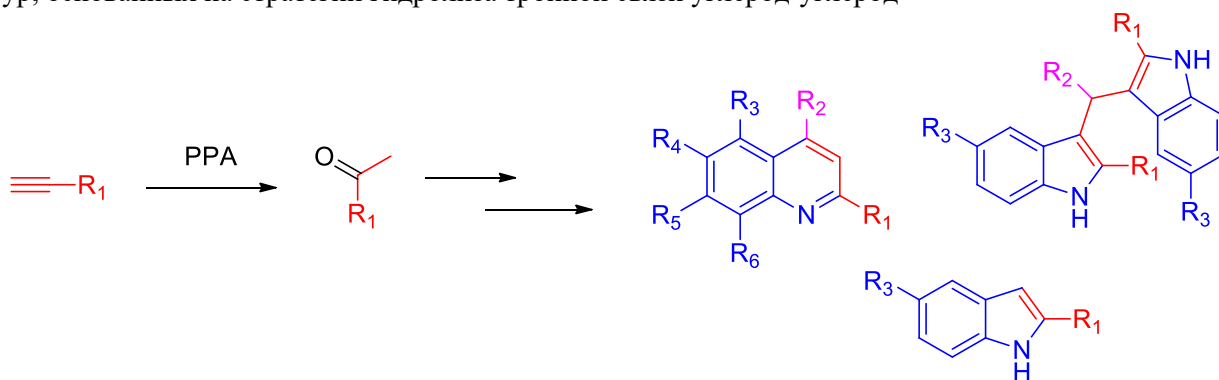
1. Н.А. Анисимова, Е.И. Христофорова, Ю.Г. Тришин, *ЖОХ*, 2015, **85(9)**, 1499.
2. Н.А. Анисимова, Е.И. Христофорова, Ю.Г. Тришин, *ЖОХ*, 2016, **86(9)**, 1482.
3. Н.А. Анисимова, Д.А. Мелькова, *ЖОХ*, 2023, **93(1)**, 50.
4. Н.А. Анисимова, Д.А. Мелькова, *ЖОХ*, 2023, **93(11)**, 1650.
5. N.A. Anisimova, V.V. Mikhailov, *Russ. J. Gen. Chem.*, 2024, **94(9)**, 2248.

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ ИНДОЛОВ И ХИНОЛИНОВ НА ОСНОВЕ СТРАТЕГИИ ГИДРОЛИЗА АЦЕТИЛЕНОВ В ПОЛИФОСФОРНОЙ КИСЛОТЕ

Арутюнов Н.А., Зацепилина А.М., Макиева Д.Ч., Александрова Е.В.,
Толстов К.В., Шталь Д.А., Аксенова И.В., Аксенов А.В.

*Северо-Кавказский Федеральный Университет,
химический факультет, Ставрополь, Россия.
e-mail: nik.arutiunov@bk.ru*

Алкины являются универсальными строительными блоками в органическом синтезе и зарекомендовали себя при сборке широкого спектра карбоциклических и гетероциклических соединений. Новые методы гидролиза тройных связей в карбонильные соединения откроют дверь к эффективному использованию ацетиленов в синтезе новых гетероциклических соединений. По причине того, что большинство синтетических методов получения представляют собой катализируемые металлами превращения, и часто используемые металлы дороги или токсичны, делает поиск новых альтернативных методов интереснейшей задачей для ученых. В данной работе представлены новые подходы к сборке индольных и хинолиновых структур, основанных на стратегии гидролиза тройной связи углерод-углерод



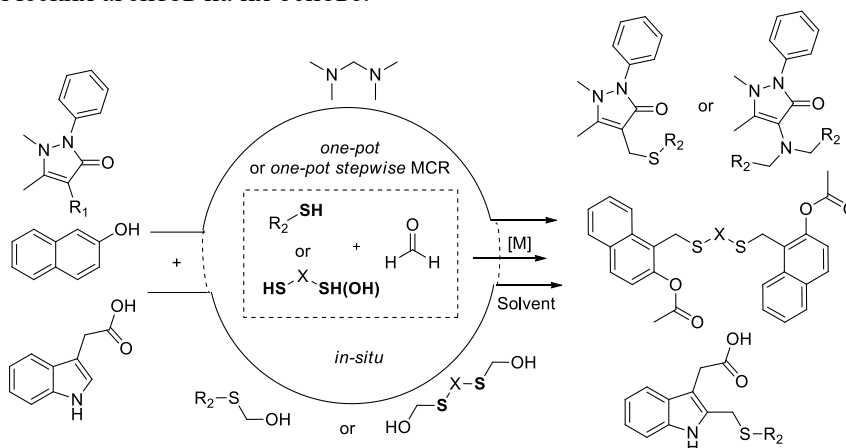
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00126).

КАТАЛИТИЧЕСКАЯ *ONE-POT* S-ФУНКЦИОНИЗАЦИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ СН-КИСЛОТАхмадиев Н.С.^а, Галимова Э.М.^а, Леонтьев Д.В.^б, Ахметова В.Р.^б

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,
^алаборатория молекулярного дизайна и биологического скрининга
 веществ-кандидатов для фарминдустрии,
^блаборатория гетероатомных соединений, Уфа, Россия
 e-mail: nail-ahmadiev@mail.ru

Химия гетероциклических соединений представляет значительный интерес для исследователей в связи с широким спектром практического применения этих соединений. [1]. Одним из привилегированных подходов к синтезу гетероциклических каркасов остаются *one-pot* или *one-pot stepwise* мультикомпонентные реакции [2]. В то же время, дизайн новых лекарственных средств и биологически активных соединений, наиболее эффективно реализуется с использованием диверсифицированно-ориентированного синтеза на ранних этапах проектирования и выбора стратегии синтеза целевых молекул [3].

В данном докладе будут обсуждены *one-pot* или *one-pot stepwise* подходы с использованием каталитической активации ароматических СН-кислот, формальдегидом или *N,N,N',N'*-тетраметилметандиамином и различными SH-кислотами [4-6]. Представленная методология конструирования S-функционализированных ароматических СН-кислот может рассматриваться как первый уровень диверсификации. Полученные соединения представляют интерес в качестве потенциальных антиоксидантов, нестероидных противовоспалительных соединений, прекурсоров металлоорганических соединений и селективных цитотоксических агентов на их основе.



Литература

1. В.Н. Чарушин, Е.В. Вербицкий, О.Н. Чупахин и др. *Успехи химии*, 2024, **93**, RCR5125.
2. X. Ma, W. Zhang *iScience*, 2022, **25**, 105005.
3. W.R.J.D. Galloway, A. Isidro-Llobet, D.R. Spring *Nat. Commun.*, 2024, **15**, 10285.
4. N.S. Akhmadiev, E.S. Mescheryakova, V.R. Khairullina, V.R. Akhmetova, L.M. Khalilov, A.G. Ibragimov *J. Mol. Struct.*, 2021, **1228**, 129734.
5. V.R. Akhmetova, E.M. Bikbulatova, E.S. Mescheryakova, N.S. Akhmadiev, M.F. Abdullin, A.G. Ibragimov *Polyhedron*, 2020, **187**, 114678.
6. В.Р. Ахметова, Д.В. Леонтьев, Э.М. Галимова, Е.С. Мещерякова *ХГС*, 2023, **59**, 826.

Работа выполнена в рамках государственных заданий Министерства науки и высшего образования РФ (FMRS-2025-0037 и FMRS-2025-0041).

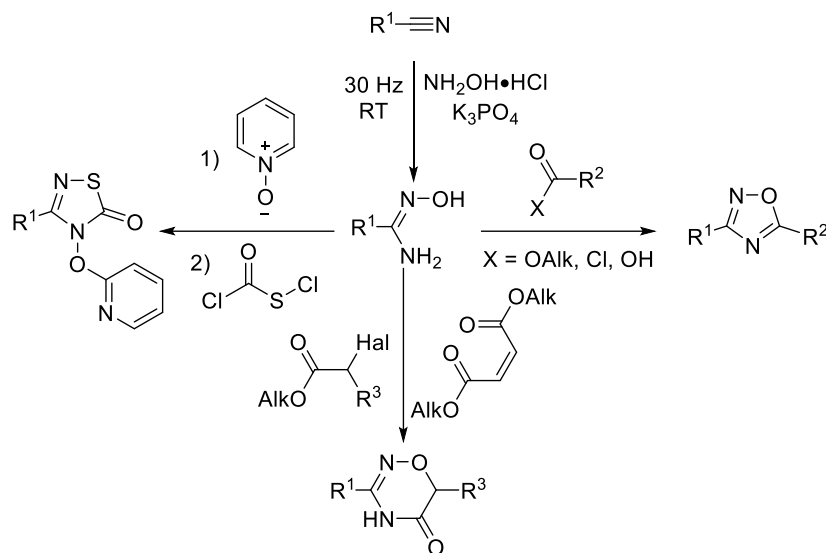
НОВЫЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ АМИДОКСИМОВ И ГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Байков С.В., Преснухина С.И., Солодянкина О.С., Байкова С.О., Боярский В.П.

Санкт-Петербургский государственный университет,
Институт химии, Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: s.baykov@spbu.ru

Амидоксимы – востребованные соединения в фармацевтике и материаловедении, особенно в контексте создания сорбентов для утилизации отходов ядерного топливного цикла [1]. В данной работе предложен механохимический метод получения амидоксимов путем реакции нитрилов с гидроксиламином, что обеспечивает экологически эффективный синтез, позволяющий в том числе модифицировать полисилоксаны.

Кроме того, амидоксимы находят широкое применение в синтезе разнообразных пяти- и шестичленных азотсодержащих гетероциклов [2]. Наиболее распространённым направлением их использования является получение 3,5-дизамещённых-1,2,4-оксадиазолов [3]. Однако в последние годы достигнут значительный прогресс по трансформации амидоксимов в другие гетероциклические системы. В частности, в нашей научной группе разработаны методы синтеза 1,2,4-оксадиазин-5(6H)-онов и 4-(пиридин-2-илокси)-1,2,4-тиадиазол-5(4H)-онов.



Общая схема рассматриваемых реакций.

Литература

1. C. Bi, J. Nian, C. Zhang, L. Liu, L. Zhu, R. Zhu, Q. Qi, F. Ma, H. Dong and C. Wang, *Prog. Nucl. Energy*, 2023, **155**, 104515.
2. S. Baykov, A. Semenov, M. Tarasenko, V. P. Boyarskiy *Tetrahedron Lett.*, 2020, **61**, 152403.
3. S. V. Baykov, A. A. Shetnev, A. V. Semenov, S. O. Baykova, V. P. Boyarskiy *Int. J. Mol. Sci.*, 2023, **24**, 5406.

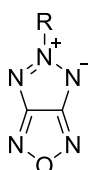
Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по крупному научному проекту по приоритетным направлениям научно-технологического развития (грант № 075-15-2024-553).

МЕТОДЫ ФОРМИРОВАНИЯ ТРИАЗОЛОФУРАЗАНОВОГО КАРКАСА

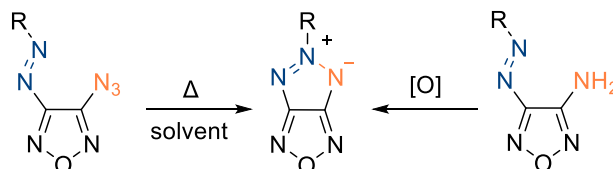
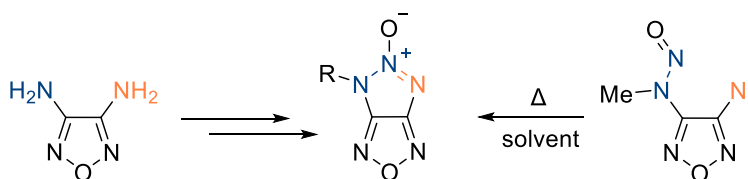
Балабанова С.П.^{а,б}, Воронин А.А.^а, Чураков А.М.^а, Кленов М.С.^а^а Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского
Российской академии наук, Москва, Россия.^б Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия.
e-mail: spbalabanova@edu.hse.ru

[1,2,3]Триазоло[4,5-с][1,2,5]оксадиазол (триазолофуразан, ТФ) – это высокоэнтальпийная гетероциклическая 5+5 система, состоящая из двух прочных ядер (1,2,3-триазола и фуразана). За счёт большого количества связей N–N и C–N и циклического напряжения триазолофуразан представляет собой один из лучших каркасов для построения энергоёмких молекул, который можно собрать из элементов второго периода. Несмотря на привлекательность такой системы, до наших исследований в литературе было известно небольшое количество примеров производных ТФ. Помимо того, что ТФ цикл не являлся «главным героем» в этих работах, все известные производные были функционализированы преимущественно алкильными, арильными и гетарильными заместителями.

Наша работа посвящена разработке оригинальных и универсальных методов синтеза триазолофуразанов, функционализированных заместителями различной природы не только через связь C–N, но и N–O, а также N–N. Нами выделено несколько основных подходов к синтезу таких соединений: термолитическая циклизация азидазофуразанов, окислительная циклизация аминоазофуразанов, замыкание биснитраминофуразанов через стадию генерации катиона оксодиазония, а также функционализация незамещенного триазолофуразана. Разработанные методы позволили получить обширную библиотеку производных ТФ и выявить корреляции «структура-свойство»[1].

*Известно в литературе:*

~ 15 соединений (R = H, Alkyl, Ar, Het)
~ 10 публикаций в открытой печати

R = NR₂, Aryl, Het, Alkyl

R = H, Me

Литература

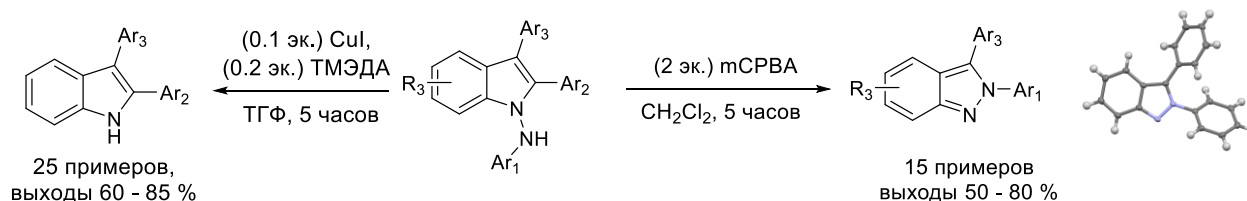
1. S. Balabanova, A. Voronin, A. Churakov, M. Klenov, I. Fedyanin, A. Pivkina, D. Meerov, T. Kon'kova, Y. Matyushin, Y. Strelenko, K. Erokhin, V. Zelenov, V. Tartakovsky. *CrystEngComm*. 2024, **26**, 3349-3362.

НОВЫЕ ТРАНСФОРМАЦИИ N-АНИЛИНОИНДОЛОВ

Барковский С.В.^а, Нечаев М.С.^{а,б} Лысенко К.А.^а, Ненайденко В.Г.^а^аМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.^бИнститут нефтехимического синтеза имени А.В.Топчиева РАН,
Москва, России.e-mail: savva.barcovsky@mail.ru

При изучении химических свойств 1-анилин-2,3-дифенилиндола было выявлено, что данная система вступает в окислительно-восстановительные реакции с получением либо нового гетероцикла – индазола, как продукта окисления, либо 1-Н-2,3-дифенилиндола, как продукта восстановления. Были оптимизированы условия проведения реакций, исследовано влияние заместителей в исходном индоле на выход реакций, а также механизмы реакций (расчет DFT, экспериментальные данные). Структура полученных соединений надежно подтверждена физико-химическими методами или сравнением полученных ¹H и ¹³C ЯМР спектров с литературными данными.

Особо важно отметить реакцию восстановления, в которой участвует комплекс меди в каталитических количествах, так как это открывает новые возможности для восстановления связи N-N, которые ранее не были описаны в литературе.



НОВЫЕ КОНЬЮГАТЫ НА ОСНОВЕ ЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОТИАЗОЛОВ И ИХ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫЕ АГЕНТЫ

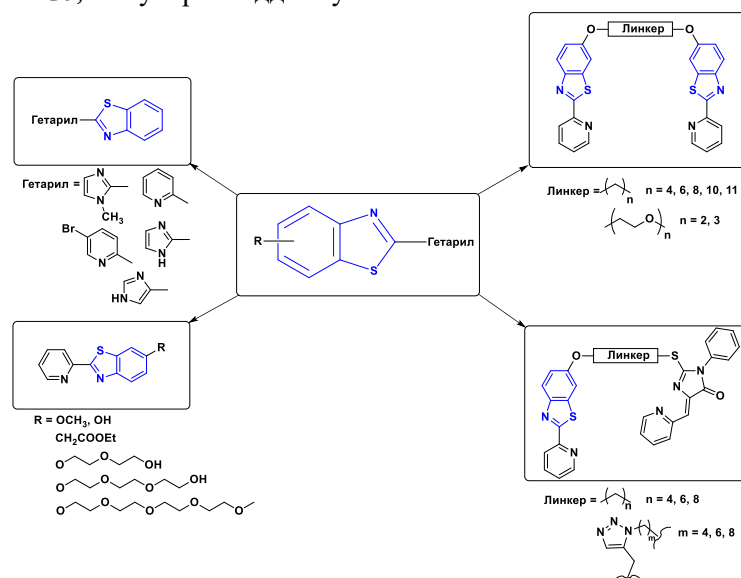
Барская Е.С., Березина А.В., Белоглазкина Е.К.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.

e-mail: barskayaes@my.msu.ru

На сегодняшний день бензотиазол считается одним из так называемых “medicinally privileged scaffold”, то есть молекулярным фрагментом, перспективным для разработки лекарственных и диагностических препаратов. Бензотиазольный фрагмент входит в состав препарата Рилузол, наиболее эффективного из зарегистрированных лекарственных средств для терапии латерального амиотрофического склероза. Особое место среди производных данного гетероцикла занимают 2-арилбензотиазолы [1]. Так, флуоресцентные красители тиофлавин S и тиофлавин Т способны специфически связываться с амилоидными фибриллами, при этом квантовый выход флуоресценции повышается на три порядка. Данное свойство обеспечило этим красителям широкое распространение в гистологических и биофизических исследованиях с 80-х годов XX века. Помимо этого, 2-арилбензотиазолы обладают противоопухолевой активностью. Ряд производных 2-(4-аминофенил)бензотиазола, показавших высокую активность, в частности, в испытаниях на клетках рака молочной железы, был использован в клинических испытаниях, однако ни одно из соединений не прошло III фазу исследований. Таким образом, несмотря на фармакофорный потенциал 2-арилбензотиазолов, для успешного использования в медицине необходима их дополнительная модификация.

В данной работе была синтезирована библиотека замещенных 2-гетарилбензотиазолов, показанных на схеме ниже, а также их координационных соединений с солями меди(II). Была изучена зависимость степени окисления меди в координационном центре от заместителей в бензотиазольном фрагменте. Полученные конъюгаты и их комплексы были исследованы на противоопухолевую активность на клеточных линиях рака молочной железы MCF-7 и рака легкого A-549. Также были изучены электрохимические свойства и редокс-активность полученных комплексов, как потенциальных низкомолекулярных аналогов Cu,Zn-супероксиддисмутазы.



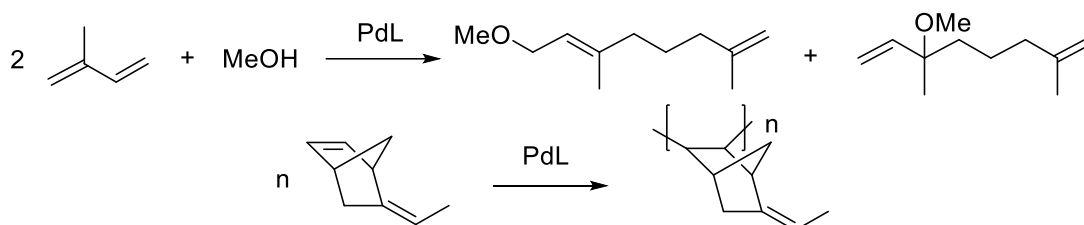
Литература

- Weekes A.A., Westwell A.D. *Curr. Med. Chem.*, 2009, **16**, № 19, 2430.

ПРИМЕНЕНИЕ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ МАЛДИ ДЛЯ МОНИТОРИНГА КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Белоглазкин А.А.^{а,б}, Ржевский С.А.^б, Асаченко А.Ф.^б, Бермешева Е.В.^б, Борисов Р.С.^{б,в}^аООО «АксельФарм», Москва, Россия^бИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия^вРоссийский университет дружбы народов им. П. Лумумбы, Москва, Россияe-mail: abeloglazkin@mail.ru

Онлайн мониторинг реакций с использованием масс-спектрометрии – одно из быстро развивающихся направлений органической химии, которое позволяет изучать пути протекания химических процессов за счет детектирования их интермедиатов. Основным инструментом такого мониторинга обычно является масс-спектрометрия с ионизацией электрораспылением (ИЭР). В ходе ИЭР непосредственная подача реакционной среды в источник ионов может значительно искажать реальный состав и распределение продуктов из-за протекания окислительно-восстановительных процессов при распылении растворов аналитов. В качестве альтернативы этого способа мониторинга может быть предложен метод матрично-активированной лазерной десорбции/ионизации (МАЛДИ). В данной работе эти методы ионизации применены для детектирования интермедиатов двух реакций – катализируемой комплексами палладия олигомеризации изопрена с метанолом и аддитивной полимеризации производных норборнена:



Анализ полученных массивов масс-спектральных данных с данными мониторинга методом ИЭР показал их заметное различие. Масс-спектры МАЛДИ реакционных сред, протекающих реакций *in situ*, содержали пики ионов, соответствующих координации катализатором различного числа молекул субстрата. Относительная интенсивность этих сигналов изменялась со временем, что свидетельствовало о протекании реакции и формировании ее конечных продуктов. В случае ИЭР вид масс-спектров от времени не зависел, детектировались только ионы, являющиеся основными интермедиатами реакций, что, видимо, является следствием их образования непосредственно в источнике ионов при распылении реакционной среды.

ЛИГАНДЫ НА ОСНОВЕ БИСПИДИНА ДЛЯ ХЕЛАТИРОВАНИЯ ^{177}Lu , ^{90}Y , ^{64}Cu , ^{44}Sc – ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ АГЕНТЫ В ТЕРАНОСТИКЕ ОПУХОЛЕЙ

**Белоглазкина Д.В.^а, Медведько А.В.^а, Крайнова М.Д.^б, Ларенков А.А.^в,
Егорова Б.В.^б, Вацадзе С.З.^а**

^аИнститут органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия.

^бМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия.

^вФГБУ ГНЦ ФМБЦ имени А.И. Бурназяна ФМБА России, Москва, Россия.

e-mail: dandelinekm@gmail.com

В последнее время в ядерной медицине большое внимание уделяется тераностическим методам – сочетанию радионуклидной диагностики и направленной терапии онкологических заболеваний.

Биспидин, обладающий предорганизованным к комплексообразованию каркасом, оказался простым в синтезе и получении модифицированных производных, а благодаря своей высокой термодинамической стабильности и кинетической инертности хелаторы на основе биспидина идеально подходят для комплексообразования металлов, обладающих малым радиусом. Ранее нами уже были продемонстрированы данные по комплексообразующей способности ацетатных производных биспидина по отношению к меди(II) [1].

Мы продолжили исследования и предположили, что катион скандия, имеющий небольшой радиус, наиболее близкий к радиусу Cu(II) среди редкоземельных элементов (РЗЭ), способен образовывать устойчивые комплексы с биспидиновыми лигандами. Иттрий по химическому поведению и размеру иона схож со скандием, и лютеций, обладающий сравнительно малым радиусом и наиболее сильными после Sc(III) комплексообразующими свойствами среди РЗЭ, также были нами рассмотрены как перспективные металлы для хелатирования лигандами.

В данной работе мы представляем хелаторы на базе биспидинов, функционализированные 1,2,3-триазолами, карбоксильными и комбинированными боковыми группами (рис. 1), а также данные по устойчивости соответствующих комплексов как в воде, так и в биологически релевантных жидкостях. Радиомечение радионуклидами было продемонстрировано *in vivo* с оценкой устойчивости радиоактивных комплексов и их распределения по органам мышей.

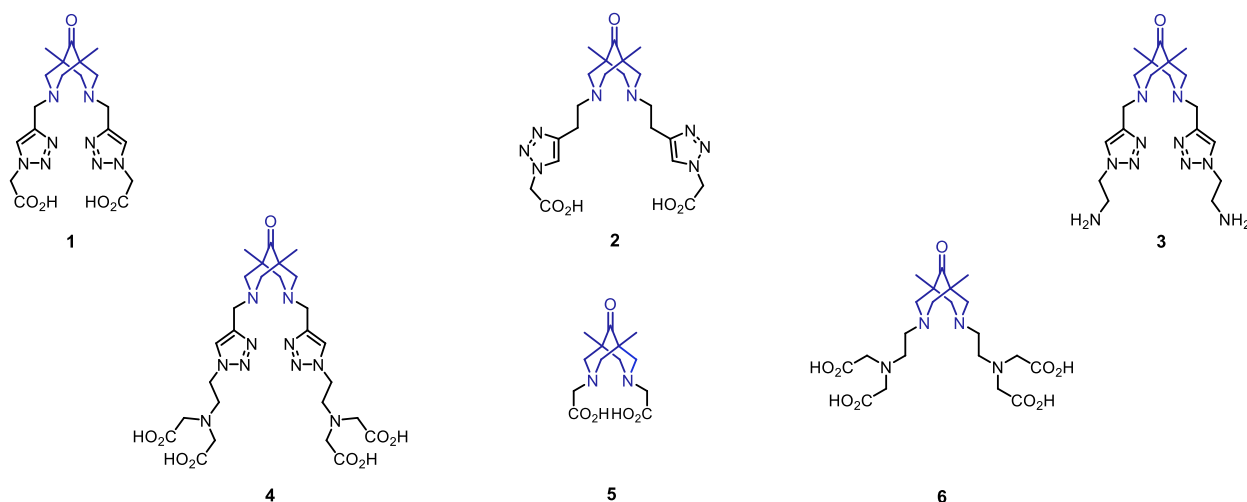


Рисунок 1. Структуры лигандов 1–6, изучаемых в данной работе.

Литература

A. V. Medved'ko, B. V. Egorova, A. A. Komarova, R. D. Rakhimov, D. P. Krut'ko, S. N. Kalmykov, S. Z. Vatsadze. *ACS Omega*, 2016, 1, 854.

АНТИКОАГУЛЯЦИОННАЯ, АНТИАГРЕГАЦИОННАЯ И БИОЦИДНАЯ АКТИВНОСТЬ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 5-АЦИЛ-1,3-ДИОКСАНА

Березняк Я.С., Султанова Р.М.

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия

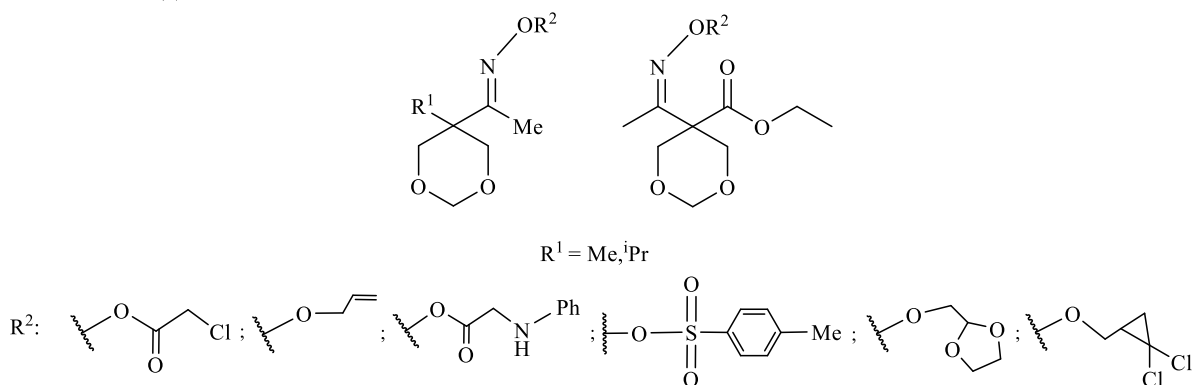
e-mail: ya.na.rt@yandex.ru

Одним из направлений развития органической химии является синтез биологически активных соединений, в том числе обладающих антикоагуляционной, антиагрегационной и бактерицидной активностью, на основе доступного нефтехимического сырья. С целью расширения библиотеки биоактивных соединений, содержащих 1,3-диоксановый фрагмент, осуществлен синтез ряда оксимов и их производных на основе 5-ацил-5-метил-1,3-диоксана, 5-ацил-5-изопропил-1,3-диоксана и этил-5-ацетил-1,3-диоксан-5-карбоксилата.

Согласно результатам микробиологической активности 5-ацил-5-изопропил-1,3-диоксан, содержащий в структуре карбонильную группу, проявил антимикробную активность в отношении грамотрицательных тест-культур, за исключением *Pseudomonas aeruginosa*. Оксим (Е)-1-(5-метил-1,3-диоксан-5-ил)этан-1-она малоактивен против стафилококка *S.aureus*, против других бактерий он неактивен.

Синтезированные простые и сложные эфиры, карбаматы проявляют антикоагуляционную активность на уровне ацетилсалициловой кислоты, а действие оксима О-фенилкарбамоил (Е)-1-(5-метил-1,3-диоксан-5-ил)этан-1-она, по проагрегантному эффекту и усилению агрегации тромбоцитов сравнимо с препаратом этамзилат натрия. Этил-5-ацетил-1,3-диоксан-5-карбоксилат и его оксим показали, что они проявляют антикоагуляционную активность на уровне ацетилсалициловой кислоты, где оксим в свою очередь уступает исходному соединению [1,2].

Таким образом, полученные соединения являются перспективными для дальнейших биологических исследований, таких как оценку влияния на гемостаз, острую токсичность и расчет условного терапевтического индекса.



Литература

1. Султанова Р.М., Борисова Ю.Г., Хуснутдинова Н.С., Раскильдина Г.З., Злотский С.С. Изв. АН Сер. хим, 2023, 72, №10, 2297-231.
2. А. И. Михалева, А. Б. Зайцев, Б. А. Трофимов Успехи химии, 2006, 75, № 9, 884-912.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR — 2025-0001 «Нефтехимические реагенты, добавки и материалы».

АЛКОКСИАЛЮМИНИЙ ДИХЛОРИДЫ КАК НОВЫЕ РЕАГЕНТЫ В СИНТЕЗЕ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПЕРГИДРОПИРАНОВ

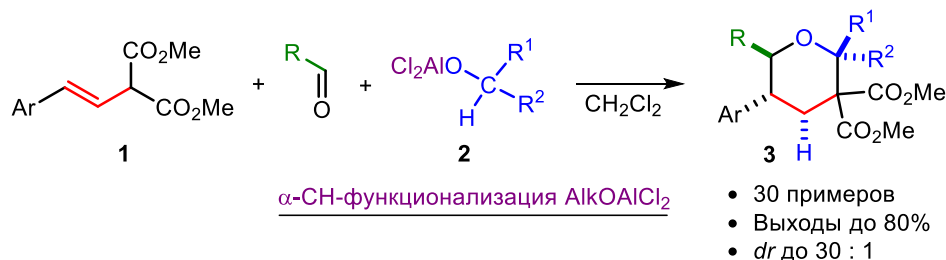
Борисов Д.Д., Новиков Р.А., Томилов Ю.В.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия.

e-mail: fantom-321@yandex.ru

Химия β -стирилмалонатов **1**, в отличие от изомерных им 2-арилциклопропан-1,1-дикарбоксилатов, до недавнего времени представляла собой малоизученную область органического синтеза, о чем свидетельствовали фрагментарные литературные данные об их химических трансформациях. В рамках наших исследований удалось расширить и систематизировать представления о химии данных субстратов, протекающих, прежде всего, под действием различных кислот Льюиса. Цикл работ, посвященных взаимодействию β -стирилмалонатов **1** с ароматическими и гетероароматическими альдегидами в присутствии $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ и GaCl_3 , позволил предложить оригинальные пути синтеза замещенных полициклических лактонов и инденов [1], 5,6-дигидропиран-2-онов [2,3], несимметрично замещенных 1,4-(циклопентатиенил)бензолов [4], а также циклопентенонов [5].

В продолжение этих исследований нами открыта новая трехкомпонентная реакция между стирилмалонатами **1**, альдегидами и алкоксиалюмний дихлоридами **2**, в результате которой с высокими выходами и высокой диастереоселективностью образуются полизамещенные пергидропираны **3** [6]. Особенностью данного процесса является не просто перенос гидрид-иона на субстрат (в отличие от реакции Меервейна-Пондорфа-Верлея), а вовлечение в циклизацию всего алкоксильного фрагмента в качестве двухатомного синтона.



В ходе оптимизации исследованы границы применимости данного метода и предложен механизм протекания реакции, в том числе с привлечением изотопомеченных соединений PhCH^{18}O и $\text{CH}_3\text{CD}_2\text{OAlCl}_2$. Показано, что для эффективного получения алкоксидов **2** можно использовать окисление EtAlCl_2 воздухом или взаимодействие эквимольных количеств AlCl_3 с первичным или вторичным спиртом. Рассмотрены также примеры синтетических модификаций полученных пергидропиранов **3**.

Литература

1. D.D. Borisov, R.A. Novikov, Y. V. Tomilov. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, **55**, 12233.
2. D.D. Borisov, R.A. Novikov, A.S. Eltyшева, Y.V. Tkachev, Y.V. Tomilov. *Org. Lett.* 2017, **19**, 3731.
3. D.D. Borisov, R.A. Novikov, Y. V. Tomilov *J. Org. Chem.* 2021, **86**, 4457.
4. D.D. Borisov, G.R. Chermashentsev, R.A. Novikov, Y.V. Tomilov. *Tetrahedron Lett.* 2019, **60**, 746.
5. D.D. Borisov, G.R. Chermashentsev, R.A. Novikov, Y.V. Tomilov. *J. Org. Chem.* 2021, **86**, 8489.
6. D.D. Borisov, R.A. Novikov, Y.V. Tomilov. *Org. Lett.* 2024, **26**, 1022.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 22-13-00418-П).

НОВЫЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ ЛЮМИНОФОРЫ НА ОСНОВЕ 2,1,3-БЕНЗОТИАДИАЗОЛА

Борщев О.В., Попова В.В., Сурин Н.М., Пономаренко С.А.

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

Будущее развитие электроники и фотоники связано с разработкой новых органических материалов, обладающих уникальными свойствами. Особое место среди них занимают различные люминофоры. Обычно они представляют собой индивидуальные соединения заданного строения и свойств. Молекулы, обладающие люминесцентными свойствами, могут быть использованы для изготовления различных устройств: дисплеев, органических светоизлучающих транзисторов, сцинтилляторов, светопреобразующих покрытий для солнечных батарей, спектросмещающих устройств и др. В докладе рассмотрены новые люминофоры на основе 2,1,3-бензотиадазола [1,2]. Новые молекулы были получены с помощью современных методов образования С-С связи по реакциям металлорганического синтеза в условиях реакций Кумады, Сузуки, прямого арилирования, позволяющим синтезировать различные органические соединения, в том числе и сопряженные, обладающие полупроводниковыми и люминесцентными свойствами. Интерес к люминофорам на основе 2,1,3-бензотиадазола обусловлен уникальными оптическими и электрическими свойствами этих молекул. Такие соединения отличаются высокой термостойкостью, большим коэффициентом поглощения, подходящими для применения в органической фотонике и электронике значениями высшей заполненной и низшей свободной молекулярных орбиталей, а также сильным межмолекулярным π - π взаимодействием. Поэтому выявить важные закономерности взаимосвязи между молекулярной структурой и спектрально-люминесцентными, термическими и кристаллофизическими свойствами новых люминофоров, содержащих 2,1,3-бензотиадазольные фрагменты, является актуальной задачей для фундаментальной науки и имеет важное значение для прикладных исследований.

Литература

1. M.S. Skorotetsky, E.D. Krivtsova, O.V. Borshchev, N.M. Surin, E.A. Svidchenko, Y.V. Fedorov, S.A. Pisarev, S.A. Ponomarenko *Dyes and Pigments*, 2018, **155**, 284–291.
2. V.A. Postnikov, N. I. Sorokina, A. A. Kulishov, M. S. Lyasnikova, T. A. Sorokin, A. Y. Freidzon, A. S. Stepko, O. V. Borshchev, M. S. Skorotetsky, N. M. Surin, E. A. Svidchenko, S. A. Ponomarenko. *Acta Cryst.*, 2022, **B78**, 261-269
3. A. Sidorenkov, O. Borshchev, A. Fazliakhmetov, A. Lukanov, B. Lubsandorzhiyev, S. Lubsandorzhiyev, D. Nanzanov, S. Ponomarenko, M. Skorotetsky, N. Surin, E. Svidchenko, N. Ushakov, D. Voronin. *Eur. Phys. J. C.*, 2022, **82**, 1038.
4. V.A. Postnikov, G.A. Yurasik, A.A. Kulishov, T.A. Sorokin, M.S. Lyasnikova, N.I. Sorokina, M.S. Skorotetsky, V.V. Popova, L.L. Levkov, O.V. Borshchev, E.A. Svidchenko., N.M. Surin, S.A. Ponomarenko *Crystals.*, 2023, **13**, 1697.
5. V.A. Postnikov, N.I. Sorokina, G.A. Yurasik, A.A. Kulishov, T.A. Sorokin, M.S. Lyasnikova, O.V. Borshchev, M.S. Skorotetsky, S.A. Pisarev, E.A. Svidchenko., N.M. Surin, S.A. Ponomarenko *ACS Omega* 2024, **9**, 13, 14932–14946.
6. V.A. Postnikov, N.I. Sorokina, G.A. Yurasik, A.A. Kulishov, T.A. Sorokin, M.S. Lyasnikova, V.V. Popova, E.A. Svidchenko., N.M. Surin, O.V. Borshchev *Crystallogr. Reports*, 2024, **69**, 1044.
7. V.A. Postnikov, N.I. Sorokina, G.A. Yurasik, A.A. Kulishov, T.A. Sorokin, M.S. Lyasnikova, O.V. Borshchev, M.S. Skorotetsky, E.A. Svidchenko, N.M. Surin, S.A. Ponomarenko *Optical Materials*, 2025, **160**, 116764.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ грант №22-13-00255-П.

ПОЛЯРНОСТЬ И СТРОЕНИЕ 1,2-ДИГИДРО-3*H*-ПИРРОЛ-3-ОНОВ, -ТИОНОВ И -СЕЛОНОВ В РАСТВОРЕВерещагина Я.А.^а, Кузнецова А.А.^а, Семкина Д.Д.^а, Волков П.А.^б, Белоголова А.М.^б^аКазанский федеральный университет,
Химический институт имени А.М. Бутлерова, Казань, Россия
e-mail: yavereshchagina@gmail.com^бИркутский институт химии имени А.Е. Фаворского СО РАН,
Иркутск, Россия

Селеновые аналоги кетонов, селонь, остаются редким семейством гетероциклов со стабильной связью C=Se. Недавно были синтезированы новые стабильные 1,2-дигидро-3*H*-пиррол-3-селонь и некоторые их аналоги [1, 2], изучение которых позволит лучше понять электронную природу связи C=Se и закономерности, управляющие ее стабильностью.

Впервые определена полярность (растворы в бензоле, 1,4-диоксане или циклогексане), и установлено строение в растворе фенил-, фурил- и тиенилдигидропирролселонь, -тионь и -кетонь **1-9** методами дипольных моментов (ДМ) и квантовой химии (табл. 1).

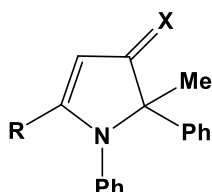
X = Se: R = Ph **1**, фурил **2**, тиенил **3**;X = S: R = Ph **4**, фурил **5**, тиенил **6**;X = O: R = Ph **7**, фурил **8**, тиенил **9**

Таблица 1. Экспериментальные ($\mu_{\text{эксп}}$), вычисленные по векторно-аддитивной схеме ($\mu_{\text{выч}}$), теоретические ($\mu_{\text{теор}}$) дипольные моменты соединений **1-9** (^ббензол, *ДМ наиболее устойчивого конформера, ¹B3PW91/6-311++G(df,p), ²B3LYP/cc-pVTZ)

μ , Д	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\mu_{\text{эксп}}^{\text{б}}$	5.82	7.00	6.98	5.27	7.06	6.80	4.82	5.78	5.68
$\mu_{\text{выч}}^*$	5.19	5.54	5.05	3.88	4.29	3.81	3.95	4.19	3.85
$\mu_{\text{теор}}^{*1}$	6.64	7.45	7.09	6.30	7.09	6.74	5.14	5.84	5.55
$\mu_{\text{теор}}^{*2}$	6.75	6.98	6.87	6.19	6.33	6.24	5.02	5.06	5.02

1,2,5-Тризамещенные 1,2-дигидро-3*H*-пиррол-3-селонь **1-3** и их аналоги **4-9** обладают рекордно высокой полярностью. Величины теоретических дипольных моментов хорошо согласуются с экспериментальными данными. В растворе соединения **1-9** существуют в виде конформационного равновесия нескольких форм независимо от природы халькогена (связь C=X) и заместителя в положении 5 пиррола. Для всех соединений наблюдается экзальтация экспериментальных и вычисленных по векторной схеме дипольных моментов ($\Delta\mu$ составляет от 0.63 Д до 2.99 Д), что в сочетании с теоретическими результатами (распределение зарядов, потенциалы ионизации, NBO анализ) неоспоримо свидетельствует о наличии системы сопряжения (связь C=X, π -система 3*H*-пиррола, ароматический (гетероароматический) заместитель в положении 5). Будут обсуждены высокая полярность, тонкие особенности электронной структуры и конформационного поведения соединений **1-9**.

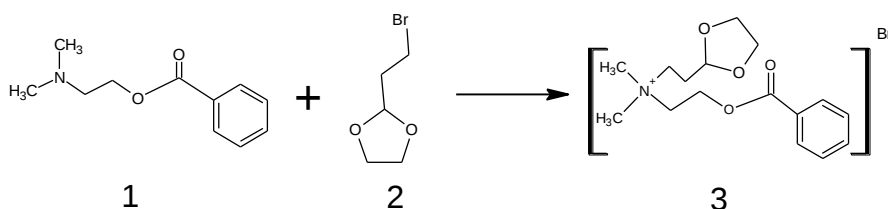
Литература

1. P. Volkov, S. Verkhoturova, K. Khrapova, S. Arbuzova, I. Bidusenko, A. Albanov, B. Trofimov *Org. Lett.*, 2024, **26**, 7336.
2. P. Volkov, K. Khrapova, A. Telezhkin, E. Vyi, A. Trofimov, I. Bidusenko, A. Albanov, A. Belogolova, B. Trofimov *Org. Biomol. Chem.*, 2025, **23**, 4702.

СИНТЕЗ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ С 1,3-ДИОКСОЛАНОВЫМ ФРАГМЕНТОМ

Войнов В.А.,¹ Борисова Ю.Г.,¹ Раскильдина Г. З.^{1,2}¹ФГБОУ ВО Уфимский государственный нефтяной
технический университет, Россия, Уфа,²ГБНУ «Академия наук Республики Башкортостан», Россия, Уфа,
e-mail: viktorvoinovalex@mail.ru

Известно, что антикоагулянты применяются для предотвращения патологического тромбообразования в сосудах и поддержания баланса гемостаза – за счет контроля дозировки препаратов. Антикоагулянты играют ключевую роль в сохранении равновесия между свертыванием и разжижением крови [1]. В настоящее время поиск новых соединений, активных по отношению к процессам гемостаза, представляет большой интерес. Авторами работы [2] установлено, что *N*-содержащие соединения с разными функциональными группами оказывают воздействие на показатели тромбоцитарной агрегации и плазменного звена свёртывающей системы крови. В этой связи, представляло интерес синтезировать четвертичную аммониевую соль **3** на основе 2-(диметиламино)-этил бензоата **1** и 2-бромэтил-1,3-диоксолана **2** и оценить ее влияние на агрегацию тромбоцитов.



Установлено, что целевой продукт **3** проявляет антиагрегационную активность (-15,3 (13,9-16,4)), превышающую значение активности ацетилсалициловой кислоты (-13,7 (10,8-16,4)). Кроме того, соединение **3** пролонгирует латентный период (+11,2 (10,4-12,5)), удлиняя реакцию высвобождения тромбоцитов относительно контроля (-2,1).

Литература

- 1 В. А. Панкратов, О. А. Сдобникова, Н. С. Шмакова Известия высших учебных заведений, 2013, 56, № 12, 101-105.
- 2 И. К. Кукушкин, Е. В. Великанова, В. А. Злобин Известия высших учебных заведений, 2010, 53, № 8, 141-143.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR — 2025-0001 «Нефтехимические реагенты, добавки и материалы».

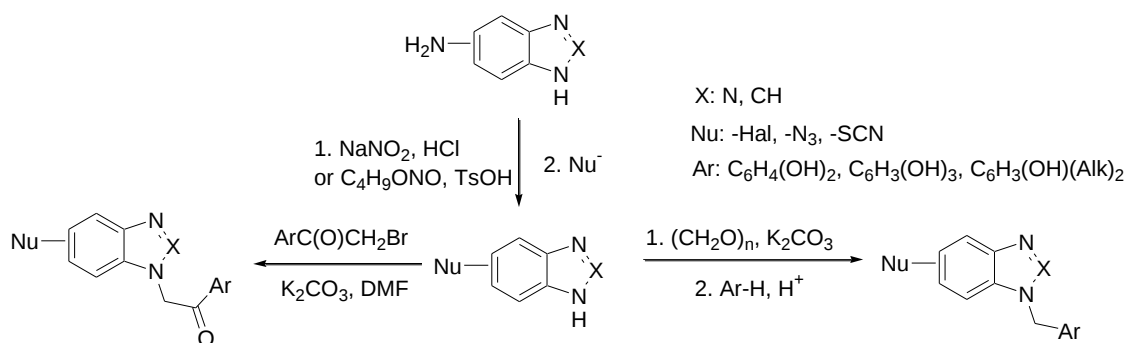
СИНТЕЗ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ЗАМЕЩЕННЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ – БЕНЗОТРИАЗОЛА И БЕНЗИМИДАЗОЛА

Воробьев С.В., Березин Л.Ю., Кошелев В.Н.

*РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина,
факультет химической технологии и экологии,
кафедра органической химии и химии нефти, Москва, Россия.
e-mail: vorstepan@yandex.ru*

Условия работы узлов и агрегатов в настоящее время выдвигают все более высокие требования к качеству материалов: самих аппаратов, а также топлив и смазывающих материалов. Для решения второй задачи широко применяются присадки, позволяющие достичь заданных характеристик топлив и масел. Актуальными на сегодняшний день являются присадки полифункционального действия, совмещающие в своей структуре фрагменты, проявляющие высокую активность в широком диапазоне температур, и позволяющих добиться разных эффектов: антиоксидантного, противокоррозионного, депрессорного, и других [1, 2].

В рамках данной работы были рассмотрены различные подходы к синтезу фенолов, содержащих гетероциклический фрагмент. Были получены производные алкилфенолов (ксиленолов, тимола, 2,4- и 2,6-ди-*трет*-бутилфенолов), и многоатомных фенолов (резорцина, пирокатехина, пирогаллола) с замещенными бензимидазолами и бензотриазолами, которые, в свою очередь, были синтезированы реакцией диазотирования соответствующих гетероциклических аминов [3]. В результате, получено два ряда соединений, один из которых получен в результате алкилирования метилольными производными гетероциклов соответствующих фенолов, другой – алкилированием гетероциклических соединений (бромметил)гидроксифенилкетонами [4]:



Строение полученных соединений было доказано с помощью ИК-спектроскопии и ЯМР-¹H и ЯМР-¹³C-спектроскопии. Для целевых соединений с помощью методов квантовой химии определены основные параметры (геометрия молекул, энергии разрыва связи О-Н в фенольном фрагменте, энергии граничных орбиталей), и показано, что полученные вещества потенциально обладают необходимыми свойствами для проявления высокой антиоксидантной и противокоррозионной активностей.

Литература

1. Y. Jin, J. Li, W. Lee et al. *Lub. Sci.*, 2020, **34**, 347.
2. A.M. Danilov *Pet. Chem.*, 2015, **55**, 169.
3. S.V. Vorobyev, A.A. Barkovskii, V.N. Koshelev *IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci.*, 2021, **808**, 012028.
4. V.N. Koshelev, O.V. Primerova, S.V. Vorobyev, L.V. Ivanova *Molecules*, 2020, **25**(10), 2370.

АЗОТСОДЕРЖАЩИЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ И ИХ КОМПЛЕКСЫ: ГЕОМЕТРИЯ МОЛЕКУЛ, ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И НЕКОВАЛЕНТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Воронина Ю.К.*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
Москва, Россия.**e-mail: juliavoronina@mail.ru*

Изучение нековалентных взаимодействий, характерных для определенных соединений в различных условиях, является ключом к пониманию различных химических, физических и биохимических процессов. В частности, исследование взаимодействий, характерных для биологически активных соединений, является наиболее доступным путем анализа действия лекарственного препарата на определенную мишень.

В данной работе представлено исследование изменений молекулярной, кристаллической и электронной структуры ряда биологически активных азотсодержащих соединений, а также нековалентных взаимодействий с их участием как в индивидуальном виде, так и в виде лигандов в координационных соединениях переходных металлов. Изучение тонких аспектов строения и поведения органических соединений при введении их в координационную сферу металла может помочь в дизайне новых лекарственных соединений, основанном на «сборке» органических и неорганических блоков, корректируя их состав и строение для получения желаемых свойств целевого соединения.

Так, методами РСА и квантовой химии проанализировано строение ряда 3-арилиден-1-пирролинов в индивидуальном состоянии, в виде солей с органическими и неорганическими анионами и в координационном окружении меди (II), цинка, кобальта и т.д. Показано, что введение производного пирролина в координационную сферу металла может приводить к изменению геометрии молекулы и ее электронного строения. Кроме того, атом азота, координированный к иону металла, перестает быть центром водородного связывания, в результате чего полностью перестраивается система межмолекулярных взаимодействий, в том числе и отвечающих за биологическую активность.

Кроме того, получены и проанализированы данные о кристаллическом строении солей производных пиридина и пиримидина, содержащих гидроксильную группу. Показана возможность формирования полиморфных форм, что определяется подвижностью системы. Кроме того, показано, что при введении некоторых производных пиридина в координационную сферу металла происходит пирамидализация атома азота, что свидетельствует об изменении электронной структуры молекул.

Литература

1. O. V. Zvereva, T. S. Rizbaeva, M. A. Shmelev, E. N. Zorina-Tikhonova, J. K. Voronina, I. L. Eremenko. *Journal of Structural Chemistry*, 2024, **65**, 1439
2. T. S. Rizbayeva, Andrey V. Smolobochkin, Almir S. Gazizov, Julia K. Voronina, Victor V. Syakaev, Daria P. Gerasimova, Olga A. Lodochnikova, Sergey V. Efimov, Vladimir V. Klochkov, Alexander R. Burilov, and Michail A. Pudovik. *The Journal of Organic Chemistry*, 2023, **88** (16), 11855-11866
3. S. Chistyakov, M. A. Shmelev, L. M. Efromeev, L. D. Popov, Yu. K. Voronina, A. A. Sidorov, I. L. Eremenko, *Russian Journal of Coordination Chemistry*, 2024, 50(11), 904–912
4. Воронина Ю.К., Зверева О.В., Шмелев М.А., Зорина-Тихонова Е.Н., Рогачев А.В., Сидоров А.А., Еременко И.Л. *Координационная химия*, 2025, 51, 343-352

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-13-00374).

2-(2-ОКСОЭТИЛИДЕН)ТИАЗОЛО[3,2-А]ПИРИМИДИНЫ КАК КЛЮЧЕВЫЕ СИНТОНЫ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО СИНТЕЗА ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Габитова Э.Р.^{а,б}, Агарков А.С.^а, Нefeldова А.А.^а, Кожихов А.А.^а, Маилан М.Г.^б,
Французова Л.В.^а, Лодочникова О.А.^а, Литвинов И.А.^а, Соловьева С.Е.^а, Антипин И.С.^б

^аИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова,
ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

^бФедеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия
e-mail: elina81100@gmail.com

В современной органической химии одним из приоритетных направлений является разработка эффективных методов конструирования новых гетероциклических каркасов, обладающих специфической биологической активностью. Среди множества гетероциклических систем, производные тиазоло[3,2-а]пиримидина, содержащие асимметрический атом углерода, представляют собой перспективные структурные блоки для разработки новых противораковых препаратов [1]. Наличие экзоциклической двойной связи в их структуре открывает возможности для селективной функционализации посредством реакций [3+2]-циклоприсоединения с диполярными молекулами, такими как азометинилиды [2,3]. Эти реакции позволяют получать сложные полициклические системы с контролируемой стереохимией, что является важным фактором при создании биологически активных соединений.

Данная работа посвящена синтезу и структурному анализу 2-(2-оксоэтилиден)тиазоло[3,2-а]пиримидин-6-карбоксилатов. Новым и важным результатом является обнаружение их высокой реакционной способности в качестве диполярофилов в реакции [3+2]-циклоприсоединения с азометинилидами, генерируемыми *in situ*. Впервые показано, что данная реакция протекает с высокой региоселективностью, приводя к образованию циклоаддуктов с определенной стереохимией, что обусловлено доминированием *анти-эндо*-переходных состояний. (Схема 1).

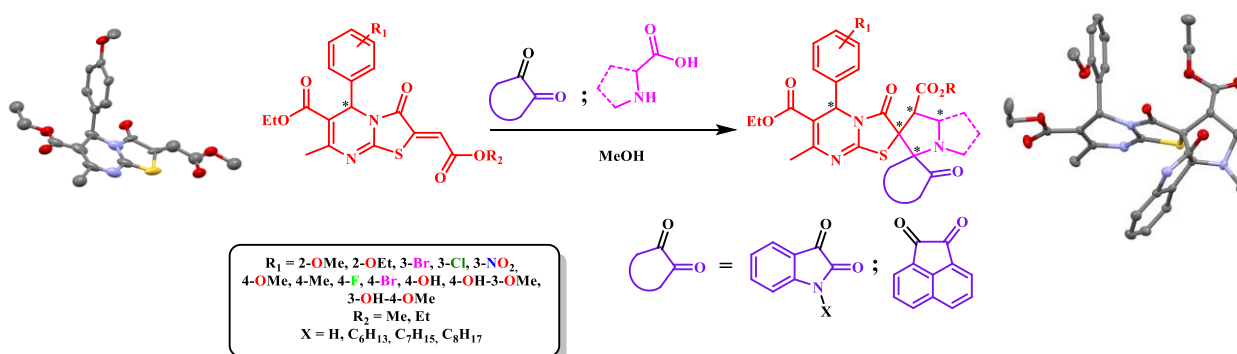


Схема 1.

Литература

1. A.S. Agarkov, A.A. Nefedova, E.R. Gabitova, D.O. Mingazhetdinova, A.S. Ovsyannikov, D.R. Islamov, S.K. Amerhanova, A.P. Lyubina, A.D. Voloshina, I.A. Litvinov, S.E. Solovieva, I.S. Antipin *IJMS*, 2023, **24**, 2084.
2. A.N. Izmet'sev, G.A. Gazieva, A. N. Kravchenko *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 2020, **56**, 255-264.
3. A.A. Nefedova, D.A. Tretyakova, D.O. Mingazhetdinova, A.S. Agarkov, A.S. Ovsyannikov, I.A. Litvinov, S.E. Solovieva, I.S. Antipin *Chemistry Proceedings*, 2024, **16(1)**, 24.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-23-00404).

ПЕРВИЧНЫЕ ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ И ФОТОХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ДЛЯ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ АЗА[5]ГЕЛИЦЕНОВ ФУРОХИНОЛИНОВОГО РЯДА

**Глебов Е.М.^а, Таможникова В.С.^а, Гривин В.П.^а, Поздняков И.П.^а,
Мельников А.А.^б, Ширинян В.З.^с**

^аИнститут химической кинетики и горения имени В.В. Воеводского СО РАН, Новосибирск, Россия

^бИнститут спектроскопии РАН, Троицк, Москва, Россия

^сИнститут органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

e-mail: glebov@kinetics.nsc.ru

Фенантрены и их гетероциклические аналоги относятся к числу важнейших азотсодержащих гетероциклических соединений благодаря хорошим оптическим свойствам (высокие квантовые выходы люминесценции, чувствительность к среде растворителя). Фотофизические свойства фенантридинового ядра поддаются тонкой настройке путем введения заместителей в различные положения фенантридинового каркаса. Характерной особенностью азагелиценов является большое различие в спектральных свойствах нейтральной и протонированной форм. В работе изучены фотофизические характеристики аза[5]гелиценов (Рис. 1). Определены квантовые выходы и времена жизни люминесценции, спектральные и кинетические параметры триплетных состояний, квантовые выходы образования синглетного кислорода [1]. В экспериментах по сверхбыстрой спектроскопии обнаружено образование «темного» (нелюминесцентного) возбужденного состояния с временем жизни ~ 200 пс; обсуждается его природа.

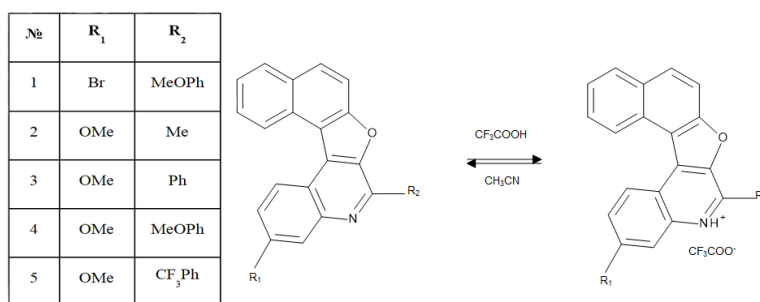


Рисунок 1. Флуоресцентные аза[5]гелицены.

Соединения обладают высокой фотостабильностью в полярных и неполярных растворителях, однако способны к фотохимическому протонированию формы в хлорсодержащих растворителях. Методом лазерного импульсного фотолиза исследован механизм реакции [2]. Показано, что первичным фотопроцессом является перенос электрона с возбужденной молекулы азагелицена на молекулу хлорсодержащего растворителя с образованием катион-радикала и последующим отрывом протона от другой молекулы растворителя.

Литература

1. V.S. Tamozhnikova, V.V. Semionova, V.P. Grivin, E.M. Glebov, R.Yu. Balakhonov, I.S. Mekeda, V.Z. Shirinian. *High Energy Chem.*, 2023, **57**, S473.
2. V.S. Tamozhnikova, V.P. Grivin, Yu.P. Tsentalovich, R.Yu. Balakhonov, I.S. Mekeda, V.Z. Shirinian, E.M. Glebov. *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, 2025, **459**, 116106.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 23-13-00226).

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ ФОТОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРОИЗВОДНЫХ
ДИЭТИНИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛОВГовди А.И., Менчиков В.В, Балова И.А.*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия.**e-mail: a.govdi@spbu.ru*

Поли(арилэнэтинилены) как флуоресцентные полимеры привлекают широкое внимание исследователей благодаря своей уникальной структурной универсальности и потенциальному применению в биовизуализации, электрических устройствах, в качестве хемосенсоров [1,2]. π -Конъюгация вдоль полимерной цепи является преимуществом, позволяя легко регулировать люминесцентные свойства таких полимеров, а их высокая чувствительность при молекулярном распознавании обусловлена усиленным гашением флуоресценции всей полимерной цепи. Специфичность к различным анализам в поли(арилэнэтиниленах) можно настраивать, изменяя жесткие элементы сопряжения вдоль основных цепей или модифицируя заместители в боковых цепях, не нарушая цепи сопряжения, что приводит к эффективной функционализации молекулы. Ранее нами было показано, 4,5-диэтинилтриазолы обладают интересными и перспективными люминесцентными свойствами [3], поэтому получение полисопряженных полимеров, где в качестве молекулярного распознавателя будут выступать 1,2,3-триазолы, и их дальнейшая модификация является перспективным и актуальным исследованием для создания новых флуоресцентных материалов с варьируемыми сенсорными свойствами для решения задач биоимиджинга.

В докладе будут обсуждаться синтетические подходы к синтезу олиго(арилэнэтиниленов) на основе 1,2,3-триазолов с использованием подхода, основанного на Pd-катализируемом кросс-сочетании по Соногашире как метод поликонденсации между 4,5-диэтинилтриазолами и 1,4-диод-2,5-диалкоксибензолом, который будет использован в качестве спейсера между звеньями диэтинилтриазола, что должно предотвратить агрегацию полимерных цепей. Также будут рассмотрены флуоресцентные и сенсорные свойства синтезированных молекул.

Литература

1. W.J. Mullin, P. Müller, A.J. Schaefer, E. Guzman, S.E. Wheeler, S.W. Thomas. *J. Mater. Chem. C* 2022, **10**, 11199/
2. M. Vintu, G. Unnikrishnan, E. Shiju, K. Chandrasekharan. *J. Appl. Polym. Sci.* 2019, **136**, 46940.
3. A.I. Govdi, P.V. Tokareva, A.M. Rumyantsev, M.S. Panov, J. Stellmacher, U. Alexiev, N.A. Danilkina, I.A. Balova. *Molecules* 2022, **27**, 3191

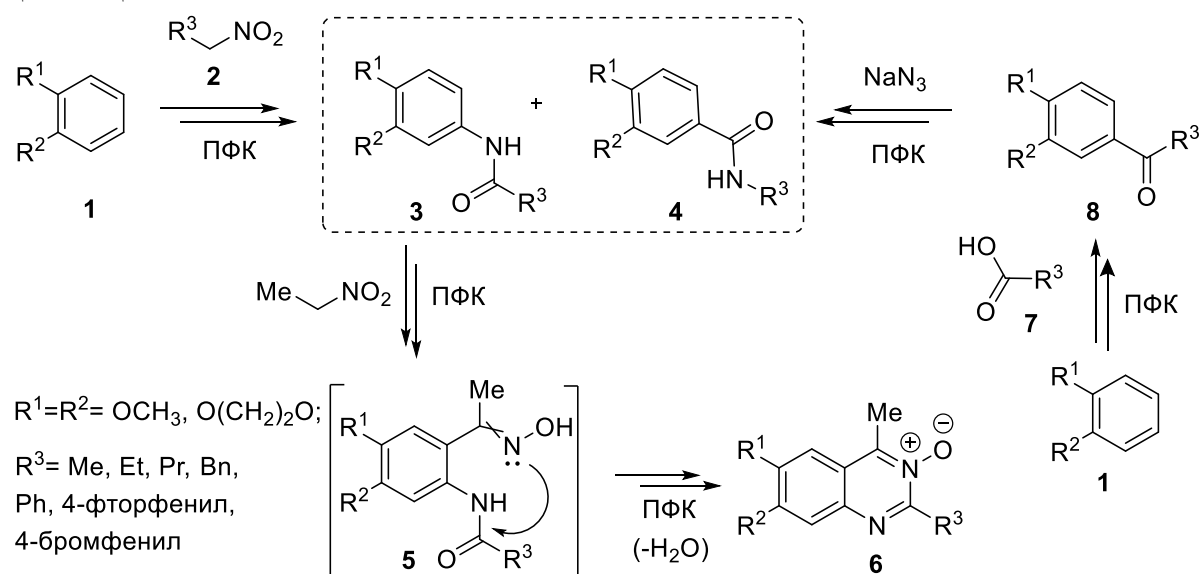
Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 075-15-2024-553). Исследования проведены с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ: «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества» и «Оптические и лазерные методы исследования вещества».

ОДНОРЕАКТОРНЫЙ СИНТЕЗ N-ОКСИДЕЙ ХИНАЗОЛИНОВ ПУТЕМ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО АЦИЛИРОВАНИЯ, АМИНИРОВАНИЯ И АЦЕТОАМИНИРОВАНИЯ АРЕНОВ В ПОЛИФОСФОРНОЙ КИСЛОТЕ

Гришин И.Ю., Аксенов Д.А., Гришин Ю.И., Джигоева Р.Г.,
Аксенов Н.А., Аксенов А.В.ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет», химический факультет,
355017 Ставрополь, ул. Пушкина 1,
e-mail: igrishin@ncfu.ru

Несмотря на достигнутый прогресс в синтезе N-оксидов, хиназолин 3-оксиды остаются недостаточно изученным классом соединений, интерес к которым обусловлен их потенциальной биологической и фармакологической активностью.

Ранее нами была разработана последовательность реакций, приводящих к получению производных 2,4-диалкилхиназолин-3-оксидов **6** из аренов [1], заключающаяся в ацетикировании аренов **1** первичными нитроалканами **2** с образованием анилидов **3**, которые при обработке нитроэтаном дают соответствующие оксимы **5**, способные к 6-экзо-триг-циклизации с последующим отщеплением молекулы воды. Далее нам представилось интересным осуществить сборку хиназолин-3-оксидов **6** в среде ПФК из легкодоступных аренов **1** путем последовательного ацилирования их карбоновыми кислотами **7** и переводом полученных кетонов **8** в желаемые анилиды **3** с использованием азидата натрия, а затем – обработкой нитроэтаном и циклизацией.



Показано, что ацилирование в ПФК гладко протекает как с алифатическими, так и с ароматическими кислотами. Превращение кетонов **8** в анилиды **3** наилучшим образом осуществляется в ПФК 75%, обеспечивая максимальное соотношение анилид 3/амид 4. Выход N-оксидов **6** по предложенному *one-pot* протоколу составил 20-60%.

Литература

1. I.Yu. Grishin, D.A. Aksenov, N.A.Aksenov, Yu.I.Grishin, A.V.Leontiev, A.V.Aksenov *Tetrahedron*, 2025, **177**, 134589.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FSRN-2023-0005).

ПОЛУЧЕНИЕ ХРОМТРИКАРБОНИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ АЗОТ- И КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Гришина Н.Ю., Сазонова Е.В., Ушакова П.С., Гришин А.В.

Нижегородский государственный университет имени Н.И. Лобачевского,
химический факультет, Нижний Новгород, Россия.
e-mail: zarovkinan@mail.ru

На основе представленных на рис. 1 N,N-, N,O- и O,O-содержащих конденсированных гетероциклических соединений, а именно 1,3-бензодиоксолов, 1,3-бензодиоксанов, гидрохиноксалинов, 1,3- и 1,4-бензоксазинов, в реакции с триамминхромтрикарбонилем ($\text{Cr}(\text{NH}_3)_3(\text{CO})_3$) получены соответствующие (η^6 -арен)хромтикарбонильные производные. Синтезированные комплексы представляли собой желтые кристаллические вещества, их чистота и строение подтверждены с помощью УФ-, ИК-, ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии, высокоэффективной жидкостной хроматографии и рентгеноструктурного анализа (рис. 2). Показано влияние строения исходного ареносодержащего лиганда на регио- и диастереоселективность процессов комплексообразования, приводящих в ряде случаев к смеси изомерных продуктов, которые удалось разделить с помощью колоночной хроматографии в инертной атмосфере.

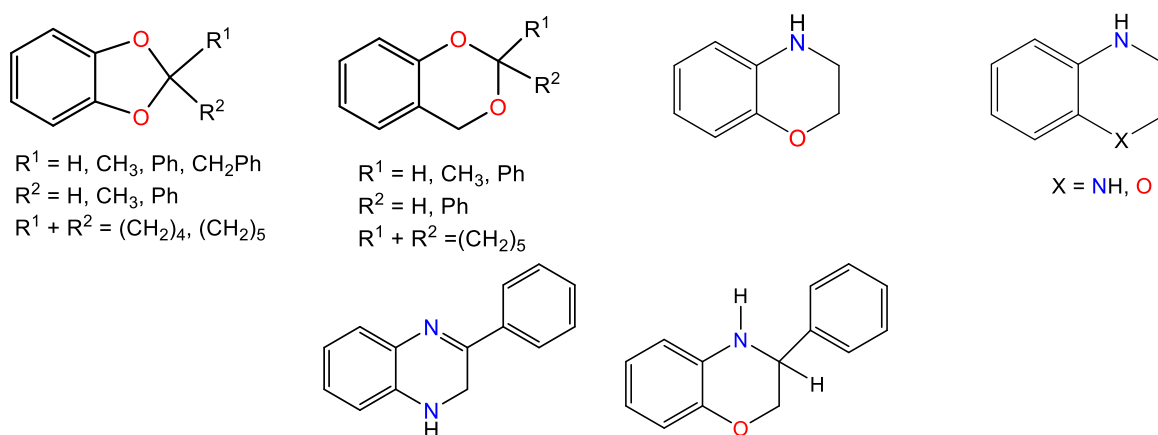
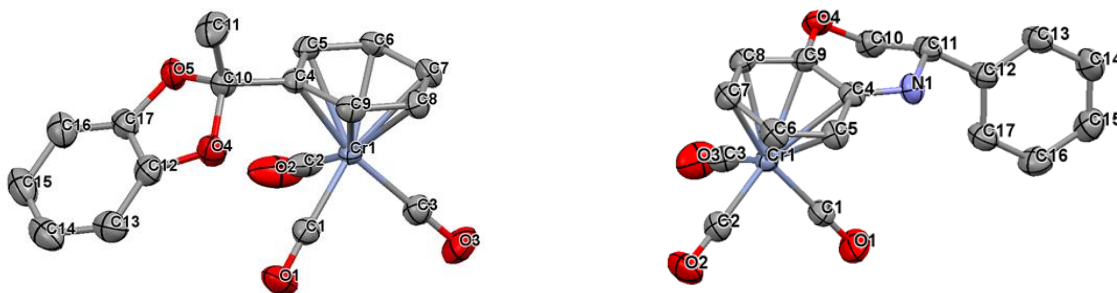


Рис.1. Структурные формулы исходных гетероциклических лигандов.

Рис.2. Молекулярные структурные некоторых целевых (η^6 -арен)хромтикарбонильных комплексов.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы стратегического академического лидерства «Приоритет - 2030».

СИНТЕЗ НОВОГО КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКОГО ТЕТРАМЕРА, СОДЕРЖАЩЕГО НЕСИММЕТРИЧНЫЕ 2,7-ДИАЛКИЛЗАМЕЩЕННЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ БЕНЗО[*b*]БЕНЗО[4,5]ТИЕНО[2,3-*d*]ТИОФЕНА

Гудкова И.О., Боршев О.В., Пономаренко С.А.

Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С.

Ениколопова Российской академии наук, Москва, Россия.

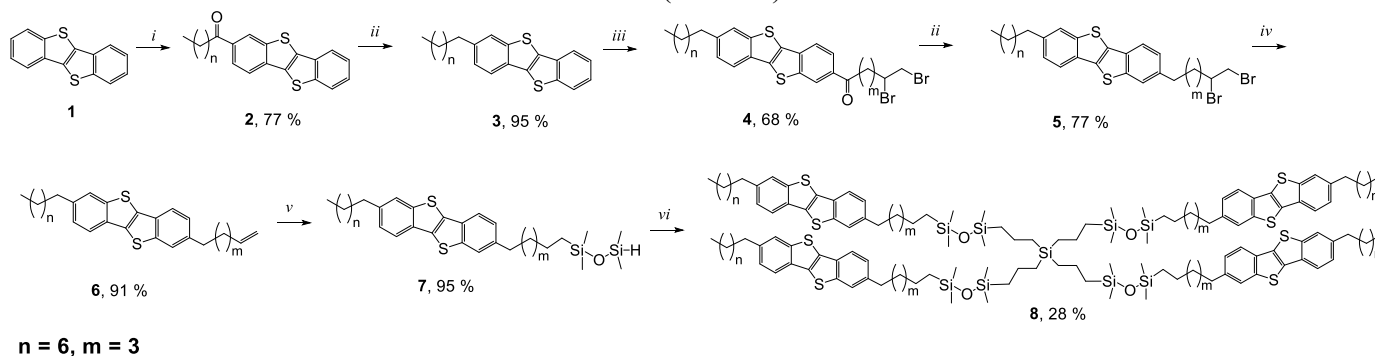
e-mail: i.gudkova@ispm.ru

В настоящее время органические полупроводники являются одними из наиболее перспективных материалов для применения в различных устройствах микроэлектроники, таких как органические фотовольтаические элементы, органические полевые транзисторы (ОПТ) и различные сенсоры на их основе [1, 2].

В качестве полупроводников в органической электронике все чаще используются производные бензо[*b*]бензо[4,5]тиено[2,3-*d*]тиофена (ВТВТ), что обусловлено их хорошей растворимостью, высокой кристалличностью и простотой модификации функциональных групп [3].

В данной работе была разработана и осуществлена стратегия синтеза нового тетракис(3-(1,1,3,3-тетраметил-3-(6-(7-октилбензо[*b*]бензо[4,5]тиено[2,3-*d*]тиофен-2-ил)гексил)дисилоксанеил)пропил)силана **8**.

(Схема 1).



i – октаноилхлорид, AlCl_3 , CH_2Cl_2 , -70°C ; *ii* – LiAlH_4 , AlCl_3 , CH_2Cl_2 , Et_2O , 36°C ; *iii* – 5,6-дибромгексаноилхлорид, AlCl_3 , CH_2Cl_2 , -40°C ; *iv* – Zn , AcOH , *mw*; *v* – TMDS , катализатор Карstedта, толуол, 70°C ; *vi* – тетрааллилсилан, катализатор Карstedта, толуол, 70°C

Схема 1. Синтетическая стратегия получения соединения **8**.

Синтез целевого соединения осуществляли путем последовательного ацилирования по Фриделю-Крафтсу с последующим восстановлением кетогруппы [4]. На заключительном этапе проводилась реакция снятия бромной защиты с образованием концевых двойных связей. Получение соединения **7** и **8** осуществлялось по реакции гидросилилирования в присутствии катализатора Карstedта [5]. Низкий выход реакции на последней стадии обусловлен образованием смеси из моно-, ди-, три- и тетрамеров, не смотря на 5-кратный избыток соединения **7**, что подтверждено данными ГПХ-анализа. Структуры всех полученных соединений подтверждены методами ^1H - и ^{13}C -ЯМР-спектроскопии, элементного анализа и данными ГПХ.

Литература

1. S. Ma, H. Zhang, K. Feng et al. *Chem. Eur. J.* 2022, **28**, e202200222.
2. Y. Wang, J. Zhang, S. Zhang et al. *Polym. Int.* 2021, **70**, 414–425.
3. Y.S. Chaeyoung, D. Ho, W. Chae et al. *Synth. Met.* 2022, **285**, 117022.
4. И.О. Гудкова, Е.А. Сорокина, Е.А. Заборин и др. *ЖОрХ*, 2024, **60**, 13-25.
5. O.V. Borshchev, A.S. Sizov, E.V. Agina et al. *Chem. Commun.* 2017, **53**, 885-888.

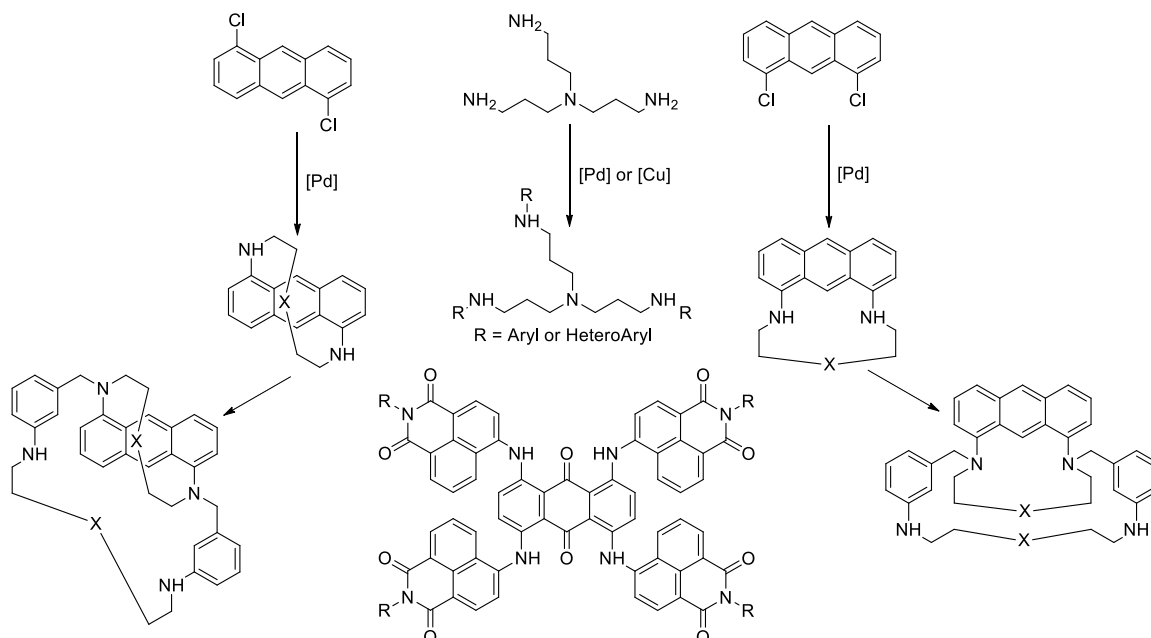
Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 19-73-30028).

МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНЫЙ КАТАЛИЗ В СИНТЕЗЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ ДЕТЕКТОРОВ И ФОТОДЕТЕКТОРОВ

Гусев Д.И.^{a,б}, Панченко П.А.^б, Аверин А.Д.^а, Белецкая И.П.^а^а *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия.*^б *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, Москва, Россия
e-mail: danya.gusev@gmail.com*

Актуальной задачей современной химии является поиск высокочувствительных и надежных способов детектирования различных заряженных и нейтральных аналитов, таких как катионы металлов, анионы, полярные органические молекулы. Один из наиболее эффективных методов использует координационные свойства соединений с флуоресцентными группами, что приводит к изменению спектров поглощения и испускания при комплексообразовании. Данный подход активно развивается в Лаборатории элементоорганических соединений химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова. Также актуальной задачей является получение малополярных органических соединений с максимумом поглощения больше 600 нм для их дальнейшего использования в качестве фотодетекторов.

В данной работе посредством Pd и Cu-катализируемого аминирования получены 3 основных класса соединений, которые были исследованы на предмет их детектирующей способности: макроциклические и макробикалические соединения на основе 1,5- и 1,8- диаминоантрацена, *N,N',N''*-три(гетеро)арилпроизводные трис(3-аминопропил)амин (TRPN), а также макроциклы на основе данного тетраамина. Макроциклические соединения на основе антрацена показали высокую селективность при детектировании катионов Cu^{2+} , а соединения на основе TRPN оказались эффективными для обнаружения катионов Al^{3+} , Ga^{3+} , Zn^{2+} , Ag^+ . Для получения длинноволновых фотодетекторов были синтезированы производные на основе 1,5-диамино- и 1,4,5,8-тетрааминоантрахинона, содержащие фрагменты *N*-алкилнафталимида. Полученные соединения характеризуются полосами поглощения с максимумами при 600 и 800 нм соответственно, а также высокими коэффициентами экстинкции на этих длинах волн, что делает их перспективными для дальнейших исследований и получения соединений аналогичного строения с еще более длинноволновыми максимумами поглощения.



НОВЫЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ АЗОТ-КИСЛОРОДНЫХ БИГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Дегтярев Д.Д., Ферштат Л.Л.

Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия

e-mail: holydanke@gmail.com

Современный подход к созданию функциональных материалов требует не только разработки веществ с продвинутыми, по сравнению с используемыми, физико-химическими параметрами, но и создания структур, отвечающих современным представлениям об их безопасной эксплуатации. Эти требования придают все большую актуальность созданию термостабильных веществ с улучшенным энергетическим профилем. Для достижения этой цели в настоящей работе предложен подход к направленному синтезу [5,6]-бигетероциклических соединений на основе азапуринового ([1,2,3]триазоло[4,5-*d*]пиримидин), и пиримидофуоксанового ([1,2,5]оксадиазоло[3,4-*d*]пиримидин *N*-оксид) каркасов, ранее не использовавшихся для создания функциональных материалов на их основе.

В ходе настоящего исследования были разработаны новые методы направленного синтеза соединений пиримидофуоксанового ряда **4a-d** с различными функциональными группами с использованием наиболее атом-экономичных синтетических подходов, а также проведена комплексная оценка физико-химических параметров полученных соединений (схема 1).

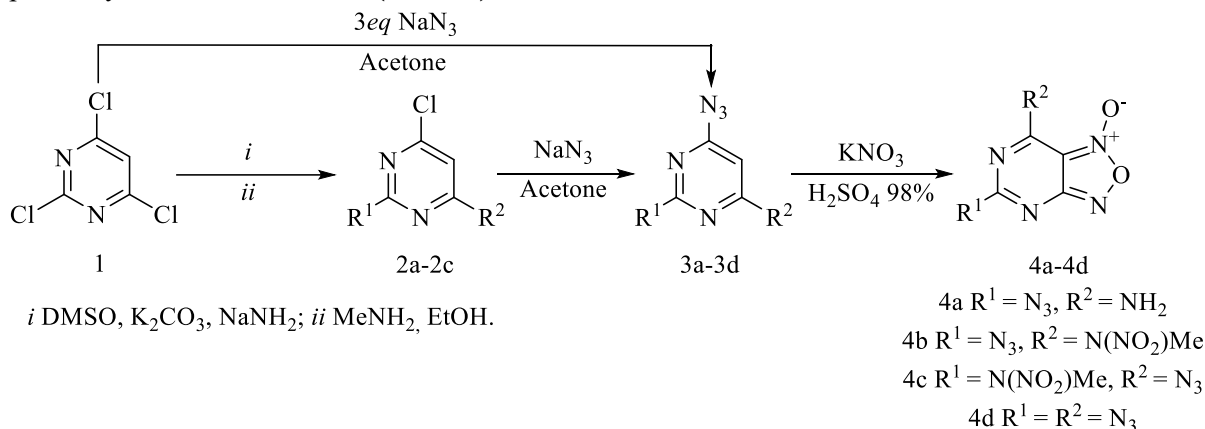


Схема 1. Общая схема синтеза соединений **4a-d**.

В рамках создания новых материалов на основе [1,2,3]триазоло[4,5-*d*]пиримидина был разработан метод получения ряда основных прокуроров **6a-c** для реализации дальнейшего синтеза целевых конденсированных систем **7a-c** с энергонасыщенным гетероциклическим заместителем во втором положении 1,2,3-триазольного цикла (схема 2).

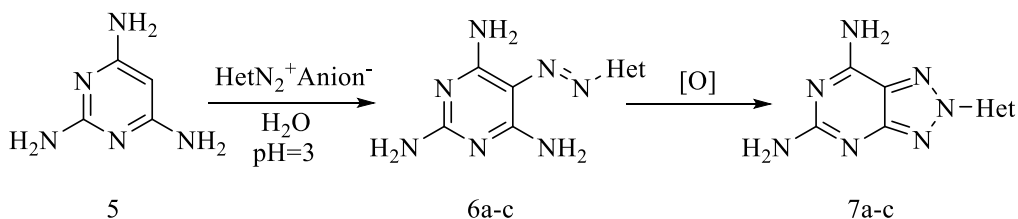


Схема 2. Общая схема синтеза соединений **6a-c**.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №23-43-00090).

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЭНЕРГОЕМКИХ ПОЛИГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ 1,2,5-ОКСАДИАЗОЛОВ

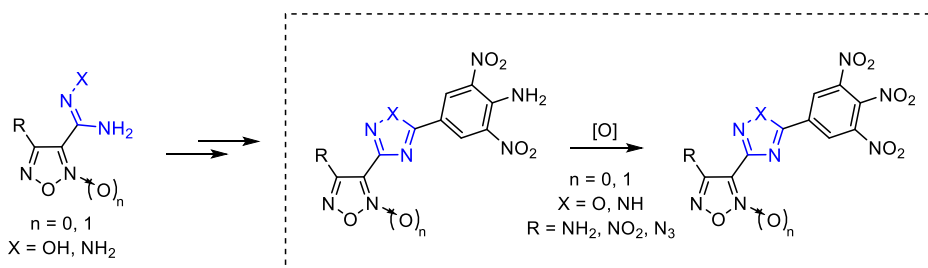
Дельцов И.Д., Ферштат Л.Л.

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

В настоящее время разработка новых энергоемких материалов, удовлетворяющих современным требованиям к экологической и эксплуатационной безопасности, является актуальным направлением исследований. Одной из перспективных стратегий разработки новых энергоемких материалов является получение полигетероциклических производных 1,2,5-оксадиазолов, содержащих другие экзоплазменные фрагменты. [1, 2].

Энергоемкие гетероциклические молекулы, содержащие в своей структуре нитрофенильные фрагменты, характеризуются низкой чувствительностью к механическим воздействиям и высокой термостабильностью, что делает синтез соединений такого типа перспективным направлением в рамках разработки энергоемких материалов нового поколения [3].

В настоящей работе исходя из 1,2,5-оксадиазолил-амидоксимов и амидразонов впервые были получены 1,2,4-оксадиазолил- и 1,2,4-триазолил-1,2,5-оксадиазолы, содержащие 4-амино-3,5-динитрофенильные и 3,4,5-тринитрофенильные заместители. Полученные соединения нечувствительны к трению и обладают высокими энтальпиями образования.



Литература

1. Fershtat L., Makhova N. ChemPlusChem, 2020, 85 (1), 13.
2. Larin A., Shaferov A., Kulikov A., Pivkina A., Monogarov K., Dmitrienko A., Ananyev I., Khakimov D., Fershtat L., Makhova N. Chem. - Eur. J., 2021, 27 (59), 14628.
3. Deltsov I., Vinogradov D., Monogarov K., Fershtat L. J. Org. Chem. 2025, 90 (1), 733.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 19-73-20074-П).

ИМИДАЗОПИРИДИНЫ ТРИТЕРПЕНОВОГО РЯДА: ДОКИНГ К VEGFR-2
И ПЕРСПЕКТИВЫ ОПТИМИЗАЦИИДенисов М.С.

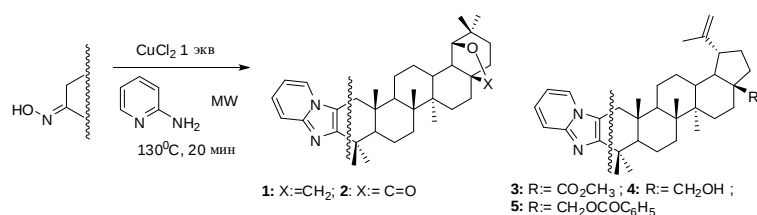
«Институт технической химии Уральского отделения Российской академии наук» - филиал Федерального государственного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук, Пермь, Россия.

e-mail: denisov.m@itcras.ru

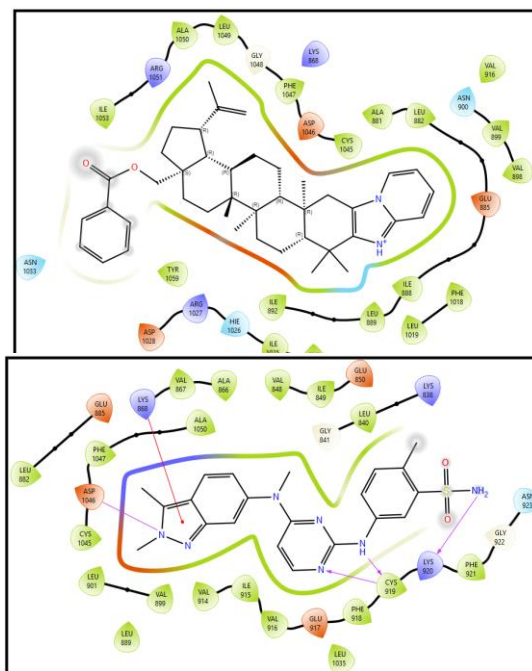
Ранее нами опубликован микроволновый синтез тритерпеновых имидазопиридинов **1–5** [1], анализ цитотоксичности которых в отношении опухолевых и нормальных клеток оказался ограничен ввиду их низкой растворимости. Действительно, при оценке липофильности методами ADME или ультрафиолетовой спектроскопии (λ_{max} : 273 и 314 нм) установлено, что показатель $\log P$ соединений **1** и **5** составляет ≥ 7 или >3 .

Вместе с тем, результаты молекулярного докинга к тирозинкиназному сайту рецептора VEGFR-2 [2] с помощью программного комплекса Schrödinger в сравнении с препаратом *пазопаниб*, используемым при лечении метастатического рака почки, свидетельствуют о перспективности разрабатываемых имидазопиридинов **1–5** в качестве противоопухолевых агентов. Например, показатель докинга вещества **5** с каталитическим центром (Lys868, Glu885, Cys1045-Phe1047) тирозинкиназы составил -4.823 (жесткая модель белка, Glide) и -8.690 (гибкая, Induced Fit Docking).

Полученные данные указывают на необходимость дальнейшей оптимизации структуры разрабатываемых соединений с целью повышения их биодоступности и противораковой активности.



Вещество	Docking score		$\log P$	
	жесткий	гибкий	эксп.	ADME
1	-3.034	Н.о.	>3	7.27
2	-4.023	Н.о.	Н.о.	6.97
3	-4.612	Н.о.	Н.о.	7.39
4	-4.454	Н.о.	Н.о.	7.22
5	-4.823	-8.690	>3	8.76
Пазопаниб	-7.916	-13.136	3.1	3.33
	Н.о. – не определяли.			

**Литература**

1. M. S. Denisov, Yu. A. Beloglazova, V. A. Glushkov *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 2022, **58**, 319.
2. W. Sun, Sh. Hu, Sh. Fang, H. Yan *Bioorganic Chemistry*, 2018, **78**, 393.

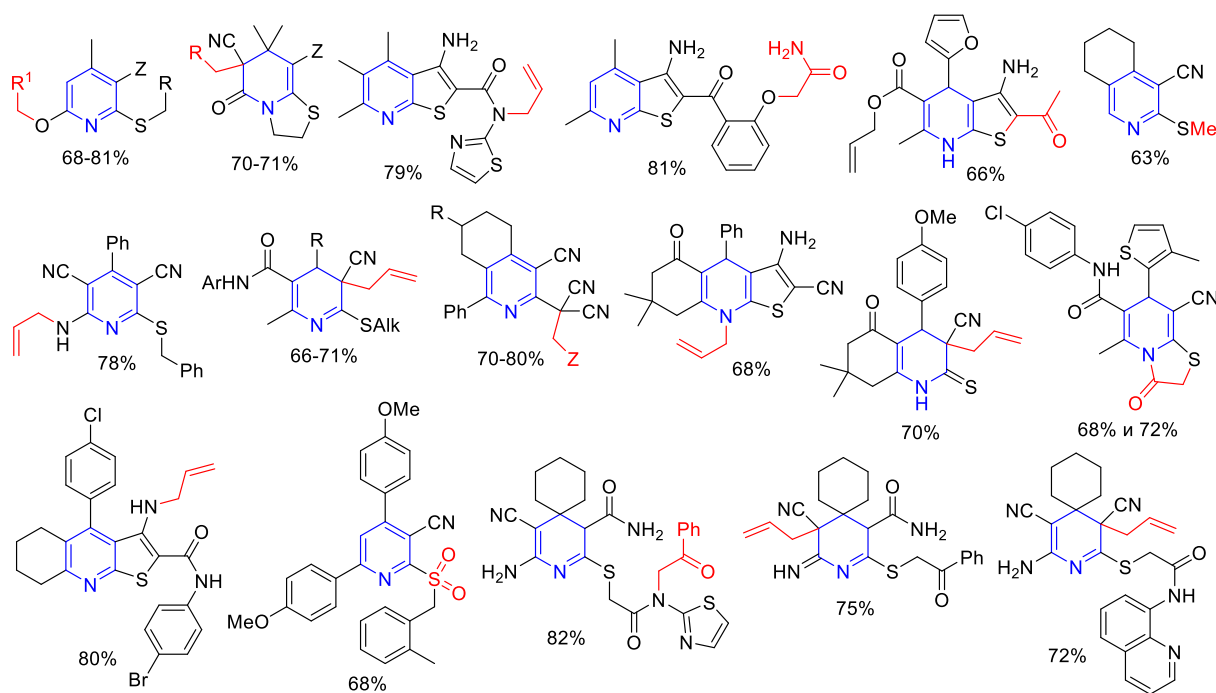
Работа выполнена в рамках государственного задания 124021400012-1.

КОНКУРИРУЮЩИЕ РЕАКЦИИ АЛКИЛИРОВАНИЯ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИНТЕЗАХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДИНА

Дяченко И.В.

Луганский государственный педагогический университет,
Институт естественных наук, Луганск, Россия.
e-mail: ivladya87@mail.ru

Разработаны эффективные многокомпонентные конденсации для синтеза аналогов биологически активных производных пиридина [1-8]. В ходе исследований изучены закономерности протекания реакций алкилирования на завершающей стадии многокомпонентных процессов с учётом наличия нескольких нуклеофильных центров.



Литература

1. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Chem. Heterocycl. Compd.*, 2020, **56**, 1579.
2. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. Chem. Bull.*, 2021, **70**, 949.
3. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Org. Chem.*, 2021, **57**, 1824.
4. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Org. Chem.*, 2022, **58**, 657.
5. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Gen. Chem.*, 2023, **93**, S61.
6. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Org. Chem.*, 2024, **60**, 588.
7. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Gen. Chem.*, 2024, **94**, 1217.
8. I.V. Dyachenko, V.D. Dyachenko, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, V.G. Nenajdenko *Russ. J. Org. Chem.*, 2024, **60**, 1619.

НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ПИРИДО[3,2-*b*]ИНДОЛОВ

Егоров Д.И.^а, Магкоев Т.Т.^а, Чаликиди П.Н.^а, Абаев В.Т.^а, Аксёнов Н.А.^б,
Колодина А.А.^в, Учускин М.Г.^г, Трушков И.В.^д

^а ФГБОУ ВО «СОГУ им. К.Л. Хетагурова», г. Владикавказ

^б СКФУ, г. Ставрополь

^в ЮФУ, г. Ростов-на-Дону

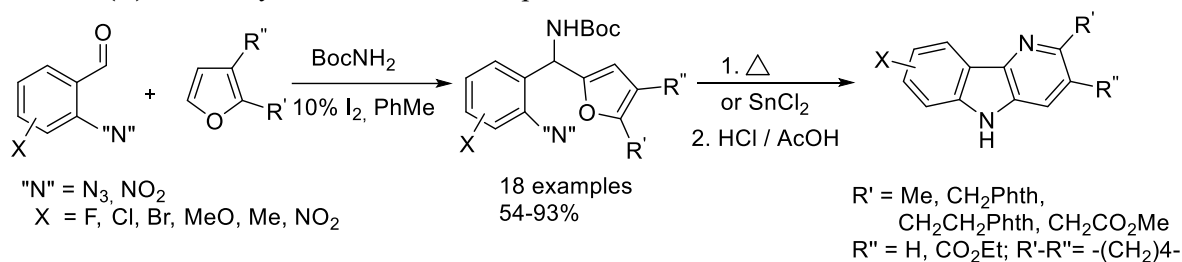
^г ПГНИУ, г. Пермь

^д МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва

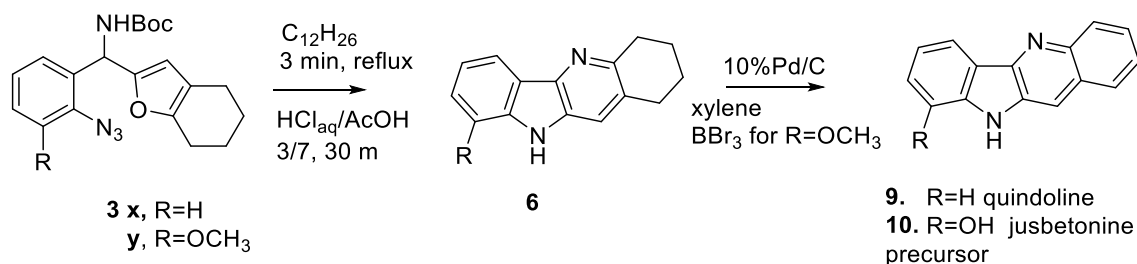
E-mail: edi-1005@yandex.ru

Пиридо[3,2-*b*]индолы относятся к относительно малоизученному подклассу трициклических азотистых гетероциклов – карболинов. В то же время, эти вещества проявляют противораковые, антимикробные и другие интересные биологические свойства, а также перспективны в качестве материалов для производства электроники.

Нам удалось разработать гибкую, конвергентную синтетическую схему на основе орто-замещённых бензальдегидов и производных фурана, ведущую к пиридо[3,2-*b*]индолам, т.е. дельта-карболинам. На первой стадии, используется амидоалкилирование фурана [1] при катализе молекулярным йодом; образующиеся при этом 5-(2-азидоарил)метил-2-алкилфураны превращаются в дельта-карболины при термоллизе [2] с последующей кислотной обработкой, а для соответствующих нитропроизводных применяется восстановление хлоридом олова (II) с последующей кислотной обработкой.



С использованием данного метода, нам удалось синтезировать такие природные соединения, как хиндолин и агликон юсбетонина.



Литература

- Shpuntov, P.M., Kolodina, A.A., Uchuskin, M.G. and Abaev, V.T. (2018), Furan Ring Opening – Pyridine Ring Closure: An Efficient Approach towards 6*H*-Isochromeno[4,3-*b*]pyridin-6-ones from Readily Available Furans and Phthalaldehydic Acid Methyl Esters. *Eur. J. Org. Chem.*, 2018: 461-469. <https://doi.org/10.1002/ejoc.201701355>
- V. T. Abaev, A. T. Plieva, P. N. Chalikidi, M. G. Uchuskin, I. V. Trushkov, A. V. Butin, A Simple Route to Polysubstituted Indoles Exploiting Azide Induced Furan Ring Opening. *Organic Letters* 2014, 16 (16), 4150-4153. <https://doi.org/10.1021/ol5018504>

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 19-03-01027).

ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНАЯ ЦИКЛИЗАЦИЯ НИТРОЗО-ПРОИЗВОДНЫХ (ИЗО)ХИНОЛИНА КАК УДОБНЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ПИРИДОФЕНАЗИНОВ

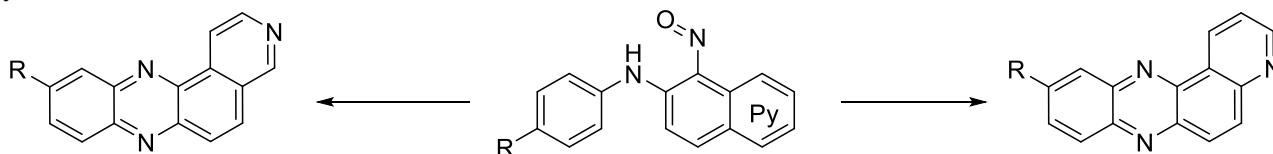
**Ермоленко А.П., Демидов О.П., Авакян Е.К., Боровлева А.А.,
Побединская Д.Ю., Ларин А.Н., Боровлев И.В.**

Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия.

e-mail: artem.p.ermolenko@gmail.com

Пиридофеназины - перспективные для изучения соединения, обладающие рядом интересных свойств. Некоторые пиридофеназины известны как лиганды в люминесцентных комплексах[1], ДНК-интеркаляторы[2], а также противораковые[3] и антибактериальные агенты[4].

В данном докладе будет описано получение пиридофеназинов из нитрозо-производных хинолина и изохинолина, путём внутримолекулярного аннелирования пиразинового кольца в кислых и основных условиях.



Литература

1. Larionov, S. V.; Kokina, T. E.; Plyusnin, V. F.; Glinskaya, L. A.; Tkachev, A. V.; Bryleva, Y. A.; Kuratieva, N. V.; Rakhmanova, M. I.; Vasilyev, E. S. Polyhedron, 2014, **77**, 75.
2. Zhang, W.; Chen, Q.-M.; Cheng, X.; Wu, N.; Yi, G.-B.; Li, D.; Tan, J.-H.; Huang, Z.-S.; Gu, L.Q.; An, L.K. Dyes and Pigments, 2013, **99**, 82.
3. Palluotto, F.; Susic, A.; Pinato, O.; Zoidis, G.; Catto, M.; Sissi, C.; Gatto, B.; Carotti, A. Eur. J. Med. Chem., 2016, **123**, 704.
4. Hamama, W. S.; Hassanien, A. E.; El Fedawy, M. G.; Zoorob, H. H. J. Heterocycl. Chem., 2014, **52**, 492.

Работа финансировалась за счёт гранта Российского научного фонда 24-23-00300, <https://rscf.ru/project/24-23-00300/>

**ПЕРЕГРУППИРОВКИ 5Н-БЕНЗО[e][1,4]ДИАЗЕПИН-2(И 3)-ОНОВ В
1,4-ДИГИДРОХИНАЗОЛИНЫ И ИХ КОНДЕНСИРОВАННЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ**

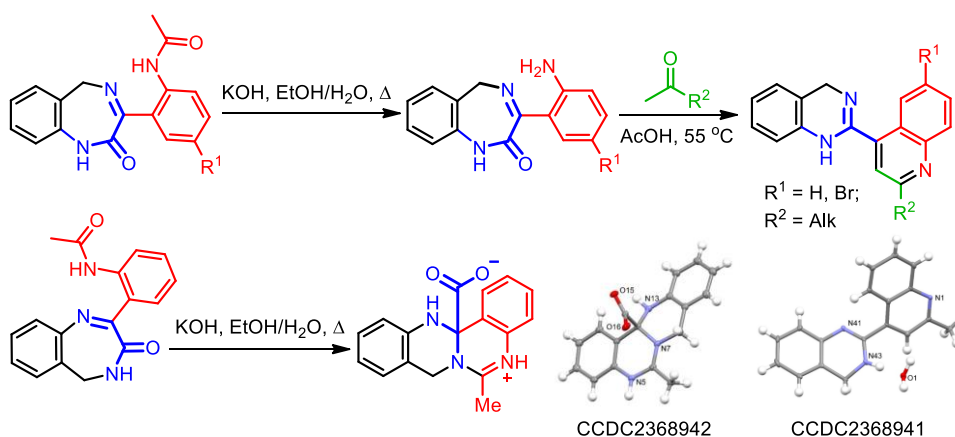
**Жукова Н.А., Сякаев В.В., Бесчастнова Т.Н., Перевалова Д.С.,
Губайдуллин А.Т., Самигуллина А.И., Синяшин О.Г., Мамедов В.А.**

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова

ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия.

e-mail: zhukova@iopc.ru

Настоящая работа является продолжением наших исследований в направлении изучения границ применимости перегруппировки Мамедова [1-3] с целью распространения ее для синтеза производных 1,4-дигидрохиназолина. Нами были найдены новые бензо[e][1,4]дiazепинон-хиназолиновые перегруппировки, которые открывают путь к ранее неизвестным и труднодоступным иными методами синтеза би- и конденсированным гетероциклическим системам с фармакофорными хиназолиновым и хинолиновым фрагментами. Было показано, что 3-(2-аминофенил)-5Н-бензо[e][1,4]дiazепин-2(1Н)-оны в кислотно-катализируемых условиях под действием алкилметилкетонов подвергаются перегруппировке Мамедова с образованием 2-(хинолин-4-ил)-1,4-дигидрохиназолинов, а N-(2-(5Н-бензо[e][1,4]дiazепин-3(4Н)-он-2-ил)фенил)ацетамид в водно-спиртовом растворе КОН претерпевает перегруппировку в 6-метил-8,13-дигидро-13aН-хиназолино[4,3-*b*]хиназолин-5-ий-13a-карбоксилат [4].



В докладе обсуждаются также возможные пути протекания рассматриваемых перегруппировок.

Литература

1. A. Hassner, I. Namboothiri *Organic Syntheses Based on Name Reactions*, 3rd ed.; Elsevier: Amsterdam, 2012, p. 299.
2. V. A. Mamedov *RSC Adv.*, 2016, **6**, 42132.
3. V. A. Mamedov, N. A. Zhukova *Synthesis*, 2021, **53**, 1849.
4. V. A. Mamedov, N. A. Zhukova, V. V. Syakaev, A. T. Gubaidullin, T. N. Beschastnova, D. S. Perevalova, O. B. Babaeva, I. Kh. Rizvanov, O. G. Sinyashin *J. Org. Chem.*, 2024, **89**, 14547.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФ (грант № 24-13-00098).

КАТАЛИТИЧЕСКОЕ АМИНИРОВАНИЕ В СИНТЕЗЕ ЛИНЕЙНЫХ И МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ ФЛУО-РЕСЦЕНТНЫХ ДЕТЕКТОРОВ НА ОСНОВЕ 1,1'-БИ(2-НАФТОЛОВ) (БИНОЛОВ)

Зазерин К.С., Якушев А.А., Аверин А.Д., Белецкая И.П.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.
e-mail: kirill.zazerin@chemistry.msu.ru

Создание УФ и флуоресцентных хемосенсоров, позволяющих детектировать катионы металлов, неорганические анионы и органические молекулы, в том числе оптически активные, является одной из актуальных задач современной органической химии [1]. В настоящей работе с помощью методов Pd- и Cu-катализируемого аминирования получен широкий ряд аминопроизводных БИНОЛа различного строения (схема 1).

Исследованы оптические свойства полученных соединений и их детектирующая способность в отношении катионов металлов и энантиомеров оптически активных органических соединений с помощью методов УФ и флуоресцентного титрования.

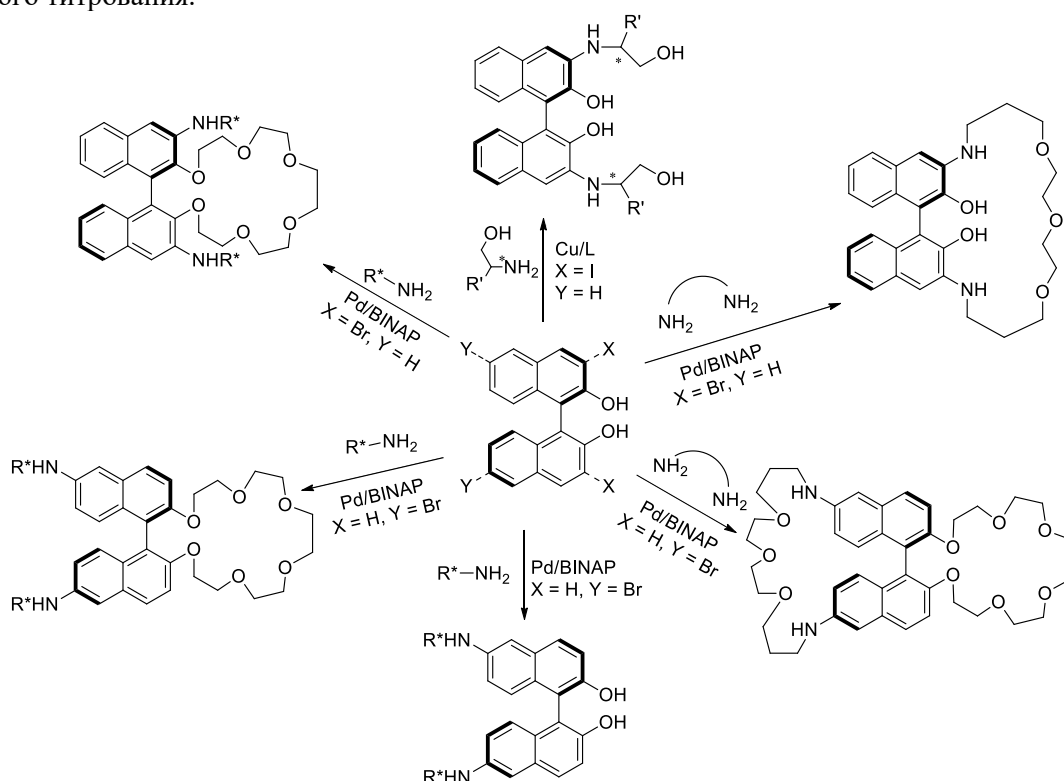


Схема 1. Синтез аминопроизводных 1,1'-би(2-нафтола)

Литература

1. Pu L. Regioselective Substitution of BINOL // Chemical Reviews. 2024. Vol. 124. P. 6643–6689.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №23-73-01049

Pd(0)-КАТАЛИЗИРУЕМАЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ НИТРОНИЛНИТРОКСИЛОВ

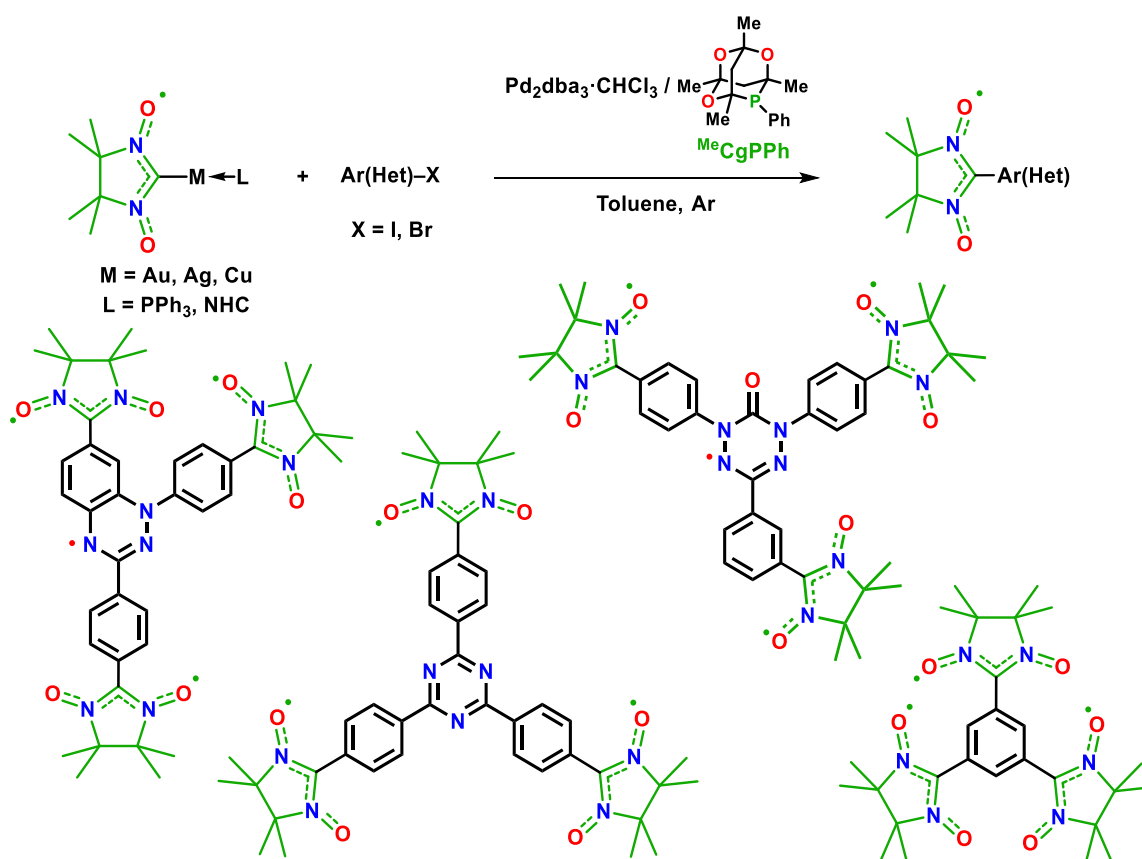
Заякин И.А., Третьяков Е.В.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

119991 Москва, Ленинский пр., 47

e-mail: zavnsc3@gmail.com

2-R-4,4,5,5-тетраметил-4,5-дигидро-1H-имидазол-3-оксид-1-оксилы, известные как нитронилнитроксилы 2-имидазолинового ряда, широко используются в качестве стабильных носителей спиновой плотности в молекулярном дизайне магнетиков, при создании молекулярных спиновых устройств разнообразной архитектуры [1]. Современным методом функционализации нитронилнитроксидов служит кросс-сочетание металлоорганических производных нитронилнитроксила (NN–ML, M = Au, Ag, Cu) с арилгалогенидами при катализе комплексами Pd(0). В докладе будут подробно рассмотрены разработанные нами протоколы построения высокоспиновых гетероциклических систем с применением реакций кросс-сочетания NN–ML [2–4].



Литература

1. E. V. Tretyakov, V. I. Ovcharenko, A. O. Terent'ev, I. B. Krylov, T. V. Magdesieva, D. G. Mazhukin, N. P. Gritsan *Russ. Chem. Rev.*, 2022, **91**, RCR5025. DOI: 10.1070/RCR5025.
2. I. Zayakin, P. Petunin, et. al. *J. Am. Chem. Soc.*, 2024, **146**. DOI: 10.1021/jacs.4c04391.
3. I. Zayakin, G. Romanenko, et. al. *Molecules*, 2023, **28**. DOI: 10.3390/molecules28227661.
4. I. Zayakin, G. Romanenko, et. al. *Organometallics*, 2025, **44**. DOI: 10.1021/acs.organomet.5c00042.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-531).

ОБЩИЙ ПОДХОД К ФУНКЦИОНИЗАЦИИ ФЕНАНТРОЛИНДИАМИДОВ ПО 4,7-ПОЛОЖЕНИЯМ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОГО ОСТОВА

Зонов Р.В., Авакян Н.А., Лемпорт П.С., Ненайденко В.Г.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.e-mail: roman.zonoff@yandex.ru

1,10-фенантролин-2,9-дикарбоксамиды являются перспективным классом органических N,O-донорных лигандов для связывания *f*-элементов и их разделения при переработке отработавшего ядерного топлива [1]. Настраивать свойства таких лигандов для решения конкретных задач возможно как путём вариации амидных заместителей, так и за счёт введения заместителей в фенантролиновый остов. Нуклеофильное ароматическое замещение является удобным методом введения заместителей различной природы в гетероциклические соединения. Ранее нами был разработан удобный метод синтеза новых фенантролиндиамидов, содержащих фтор в положениях 4 и 7 фенантролинового ядра [2].

Методами квантово-химического моделирования показано, что реакционная способность фторзамещенных фенантролиндиамидов в реакциях с нуклеофилами выше, чем у аналогичных хлорзамещенных диамидов.

С использованием реакции нуклеофильного ароматического замещения нами был осуществлен синтез ряда функционализированных фенантролиндиамидов симметричного и несимметричного строения. Стоит отметить возможность поэтапной функционализации 4,7-положения путем последовательного замещения фтора в фторсодержащих фенантролиндиамидах. Реакционная способность этих соединений апробирована в реакциях с различными C-, N-, O- и S-нуклеофилами (схема 1).

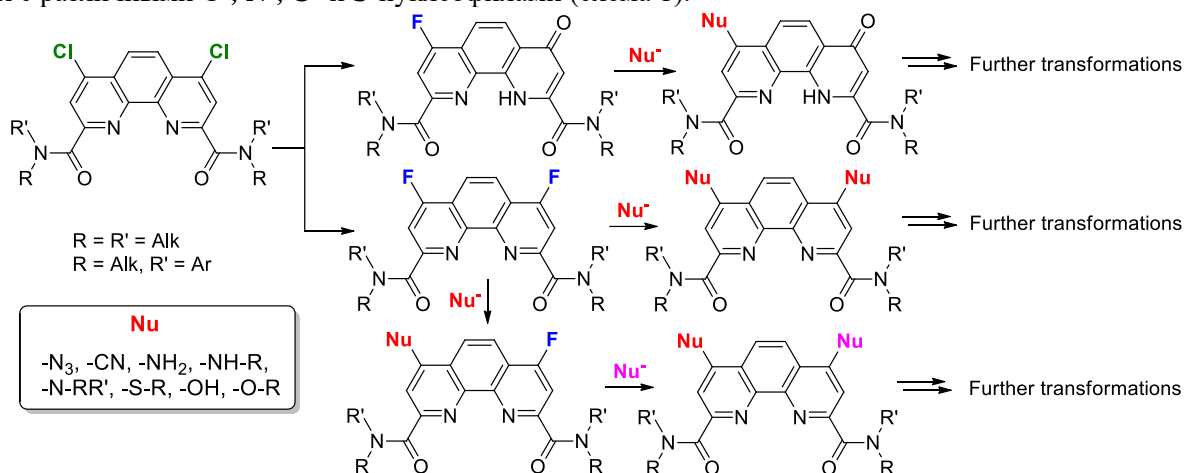


Схема 1. Синтез фторсодержащих DAPhen и дальнейшие превращения

Возможность функционализации 4,7-положений фенантролинового ядра не ограничивается реакцией нуклеофильного замещения. Так, оксо- и азидозамещённые производные способны вступать и в дальнейшие превращения, характерные для таких функциональных групп. Получено более 30 новых 4,7-функционализированных лигандов, исследуется их координационная химия, выявляются практически ценные свойства.

Литература

- Gutorova S.V. et al. *Russian Journal of General Chemistry*, 2025, **94**, 243.
- Avagyan, N.A. et al. *Inorganic Chemistry*, 2023, **62**, 17721.

КОНЬЮГАТЫ НА ОСНОВЕ АЗИНИЛФЕРРОЦЕНОВ С 1H-1,2,3-ТРИАЗОЛЬНЫМ ЛИНКЕРОМ И ИХ АНТИОКСИДАНТНАЯ АКТИВНОСТЬ

**Зырянова Е.Ю.^{а,б}, Конарев П.О.^а, Утепова И.А.^{а,б}, Махаева Г.Ф.^в, Ковалева Н.В.^в
Скорнякова Т.С.^в, Рудакова Е.В.^в, Чарушин В.Н.^{а,б}, Чупахин О.Н.^{а,б}**

^аУральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия.

^бИнститут органического синтеза УрО РАН, Екатеринбург, Россия

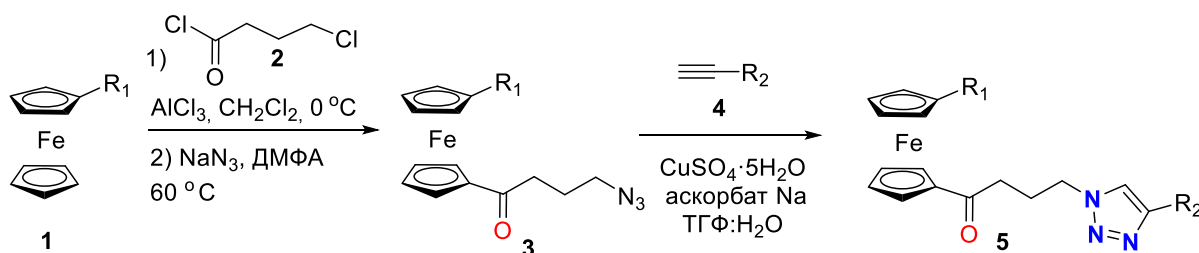
^вИнститут физиологически активных веществ ФИЦ ПХФ и МХ РАН,
Черноголовка, Россия

e-mail: zyryanovayelena@yandex.ru

Ферроценосодержащие соединения, в состав которых входит 1H-1,2,3-триазол, являются перспективным классом в медицинской химии благодаря выраженным биологическим свойствам [1]. Однако такие гибридные молекулы остаются малоизученными в качестве агентов для лечения нейродегенеративных заболеваний, в частности болезни Альцгеймера.

За последнее время нами было развито несколько подходов к модификации структуры 1-азинилферроценов [2-4]. Было показано, что производные азинилферроценов могут обладать антиоксидантной активностью, ингибиторной активностью по отношению к самоагрегации β -амилоида (1-42) [4].

В данной работе, используя Cu-катализируемое азид-алкиновое циклоприсоединение, был синтезирован ряд 1H-1,2,3-триазолов на основе азинилферроценов **5** с различными заместителями (Схема 1). Исходные 1-(азинил)-1'-(4-азидобутаноил)ферроцены **3** были получены путем последовательности реакций ацилирования азинилферроценов 4-хлорбутирилхлоридом **2** и последующем взаимодействии с NaN₃.



R₁ = хинолин-2-ил; 2,2'-бипиридин-6-ил

38-98%
30 примеров

В результате первичного фармакологического скрининга был выявлен высокий потенциал новых конъюгатов на основе азинилферроценов в качестве мощных антиоксидантов.

Литература

1. M. Koszytkowska-Stawińska, W. Buchowicz. *Dalton Transactions*, 2023, **52**(6), 1501.
2. A. A. Musikhina, I. A. Utepova, O. N. Chupakhin, A. I. Suvorova, E. Y. Zyryanova, *Mendeleev Commun.*, 2020, **30**(2), 209.
3. A. A. Musikhina, I. A. Utepova, E. Yu. Zyryanova, A. K. Terekhova, I. N. Ganebnykh, M. A. Kiskin, E. D. Kazakova, O. N. Chupakhin, *Russ. Chem. Bull.*, 2023, **72**, 2815.
4. E. Y. Zyryanova, I. A. Utepova, A. A. Musikhina, N. P. Boltneva, N. V. Kovaleva, E. V. Rudakova, O. G. Serebryakova, G. F. Makhaeva, M. A. Kiskin, V. F. Lazarev, L. S. Kuznetsova, I. V. Guzhova, O. N. Chupakhin, *Russ. Chem. Bull.*, 2024, **73**, 2408.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00298-П, 24-63-00016).

ПЕРЕГРУППИРОВКИ И ТРАНСФОРМАЦИИ В РЯДУ ИМИДАЗОТИАЗОЛОТРИАЗИНА В НАПРАВЛЕННОМ СИНТЕЗЕ КОНДЕНСИРОВАННЫХ И СПИРОКОНДЕНСИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Измest'ев А.Н., Газиева Г.А.

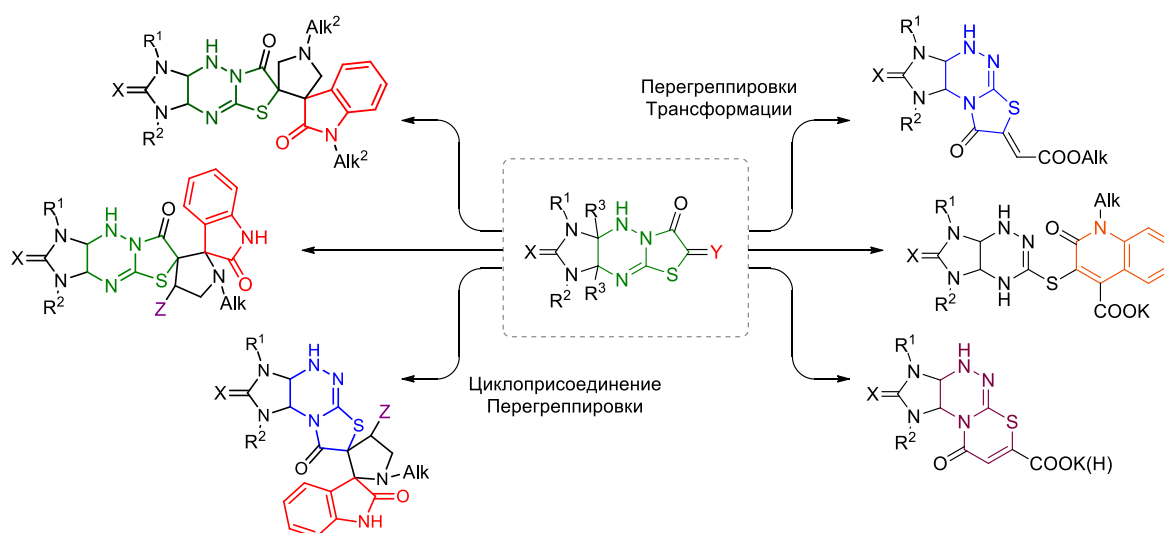
Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

e-mail: nebeli@mail.ru

Парадоксально, но, несмотря на всю привлекательность селективных процессов, единственный путь протекания многих превращений ограничивает нас в структурном разнообразии получаемых продуктов. Наиболее перспективными в синтезе фармакологически-ориентированных соединений являются методы дивергентного или направленного синтеза разнообразных структур из одних и тех же исходных реагентов [1].

В нашем случае задача дивергентного получения нескольких серий регио- или стереоизомерных гетероциклических систем решается селективными методами формирования конденсированных или спироциклических соединений на основе имидазотиазолотриазин, а также их комбинированием с основно-индуцируемыми перегруппировками и трансформациями, проводимыми в ряду как исходных, так и конечных гетероциклических систем [2,3].

Схема



Изменение условий проведения процесса, природы добавляемого катализатора, а порой даже и последовательности проведения отдельных стадий, позволяет удивительно просто изменять селективность превращений и создавать полигетероциклические структуры хемо-, регио- и диастереорегулируемым образом.

Литература

1. X. Zhao, J. Xiong, J. An, J. Yu, L. Zhu, X. Feng, X. Jiang, *Org. Chem. Front.* 2019, **6**, 1989.
2. A. N. Izmet's'ev, G. A. Gazieva, V. A. Karnoukhova, A. N. Kravchenko, *Org. Biomol. Chem.* 2020, **18**, 6905.
3. D. B. Vinogradov, A. N. Izmet's'ev, A. N. Kravchenko, Yu. A. Strelenko, G. A. Gazieva, *Beilstein J. Org. Chem.* 2023, **19**, 1047.

СКЕЛЕТНОЕ РЕДАКТИРОВАНИЕ ТЕТРАЛИНОВ В ХРОМАНЫ ПУТЕМ ОКИСЛИТЕЛЬНОГО СУЖЕНИЯ ЦИКЛОВ СИЛИЛКЕТЕНАЦЕТАЛЕЙ БЕНЗОКСЕПИНОВ

Иконникова В.А., Михайлов А.А.

ГНЦ ФГБУН Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и

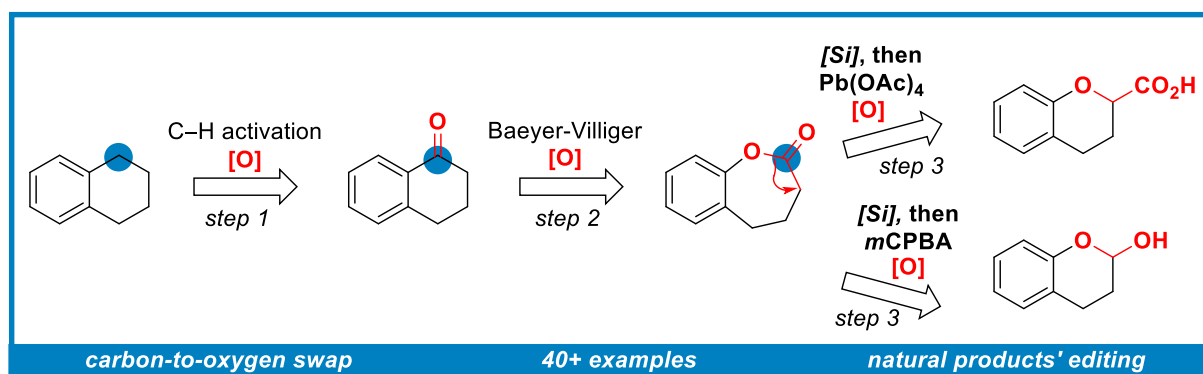
Ю.А. Овчинникова, Москва, Россия.

e-mail: viktoria.a.ikonnikova@gmail.com

В последние годы наблюдается расцвет новой концепции органической химии – скелетного редактирования [1]. Реакции, позволяющие реконструировать циклический остов молекул, в том числе природных и биологически активных соединений, особенно привлекают химиков возможностью проводить модификации веществ-лидеров на поздних стадиях, что существенно упрощает получение их аналогов для изучения зависимости структура-активность.

В данной работе был предложен подход к замене атома углерода на кислород в тетралинах с получением хроманов [2]. Это стало возможно благодаря последовательному окислению, что в свою очередь расширяет круг субстратов, подходящих для проведения редактирования, от природных тетралинов (например, эстрадиол) до индустриально важных тетраленов (например, предшественник антидепрессанта сертралина) и бензоксепинов. Ключевой стадией является окислительное сужение циклов бензоксепинов, предварительно активированных силилированием. При этом, при использовании различных окислителей, можно сохранять атом углерода в молекуле в виде карбоксильной группы или удалять его. Предположительно, удаление атома углерода происходит по новому механизму с образованием диоксикарбена.

Данная реакция показала очень высокую селективность и толерантность к группам, подверженным окислению, а также применима для редактирования и синтеза природных соединений.



Литература

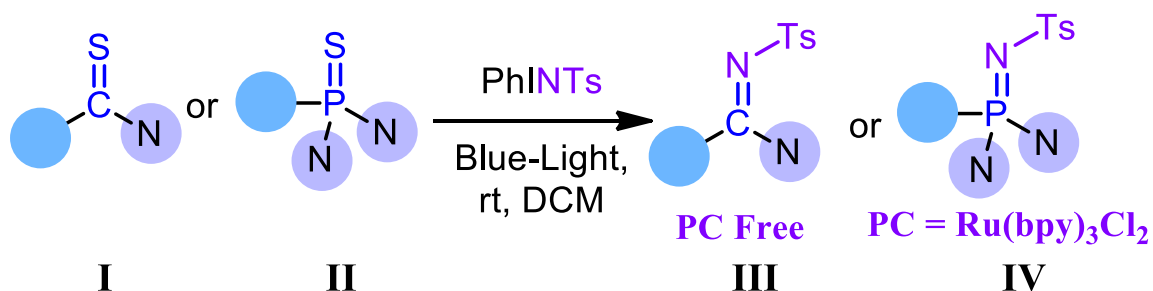
1. J. Jurczyk, J. Woo, S. F. Kim, B. D. Dherange, R. Sarpong, Levin, M. D. *Nature synthesis*, 2022, **1**, 352-364.
2. V. A. Ikonnikova, P. N. Solyev, A. M. Al Mufti, K. D. Kungurtsev, A. A. Korlyukov, M. S. Baranov, A. A. Mikhaylov *Angewandte Chemie International Edition*, 2025, **64**, e202506564.

ФОТОХИМИЧЕСКИЕ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ ТИОАМИДОВ С ИМИНОЙДИНАНОМ КАК МЕТОД СИНТЕЗА N-СУЛЬФОНИЛАМИДИНОВ

Илькин В.Г., Бакулев В.А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия.
e-mail: v.g.ilkin@urfu.ru

N-Сульфоламидины – важный класс органических соединений, проявляющие антирезорбтивную [1], антипролиферативную [2], противовоспалительную [3] и другие виды биологической активности. Важным методом синтеза (C)N-сульфоламидинов, позволяющим получать продукты с высокой степенью структурного разнообразия, являются реакции тиамидов с сульфоламидами [4]. Однако данный метод требует применения повышенных температур, длительной выдержки и использования потенциально взрывоопасных сульфоламидов. С целью преодоления указанных недостатков нами был разработан новый подход к синтезу (C)N-сульфоламидинов **III** на основе фотохимической реакции ароматических, алифатических и гетероциклических тиамидов **I** с иминоидином. Также было показано, что на основе фотокаталитической реакции (P)S-тиаидов **II** с иминоидином, могут быть получены (P)N-сульфоламидины **IV**.



Литература

1. M. Lee, M. Kim, J. Kim, S. Kim, B. Kim, I. Jeong, S. Chang, S. Kim, S.-Y. Chang *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2010, **20**, 541.
2. T. Sujaa, K. Divyaa, L. Naika, A. Kumara, A. Kamal *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2016, **26**, 2072.
3. A. Bekhit, H. Ashour, Y. Ghany, A. El-Din Bekhit, A. Baraka *Eur. J. Med. Chem.* 2008, **43**, 456
4. V. Ilkin, V. Berseneva, T. Beryozkina, T. Glukhareva, L. Dianova, W. Dehaen, E. Seliverstova, V. Bakulev *BIOC* 2020, **16**, 2937

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-13-00248).

**СИНТЕЗ И ПРОТИВООПУХОЛЕВАЯ АКТИВНОСТЬ
ИМИДАЗО[4,5-*e*][1,3]ТИАЗИНО[3,2-*b*][1,2,4]ТРИАЗИНОВ
И ИМИДАЗО[4,5-*e*][1,3]ТИАЗИНО[2,3-*c*][1,2,4]ТРИАЗИНОВ**

Исаков С.С.^{a,b}, Измest'ев А.Н.^a

^aИнститут органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

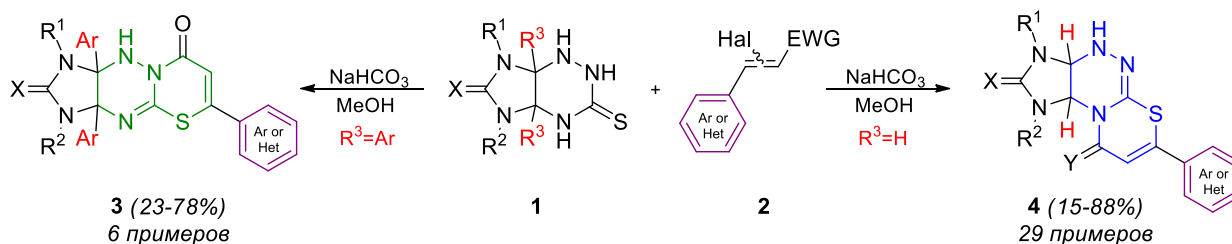
^bРоссийский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,
Москва, Россия.

e-mail: sergisakoff@yandex.ru

Азот- и серосодержащие гетероциклические соединения широко представлены в живой природе и используются для синтеза биологически активных веществ. 1,3-Тиазины широко используются в качестве антимикробных, противовирусных и седативных препаратов, а также фунгицидов и инсектицидов. 1,3-Тиазиновый цикл входит в состав некоторых природных фитоалексинов и 7-аминоцефалоспоровой кислоты (7-АСА), являющейся ключевым фрагментом цефалоспориновых антибиотиков широкого спектра действия [1].

В настоящей работе изучена реакция имидазотриазинтионов **1** с производными *альфа*- или *бета*-галогенкоричных кислот — эфирами и нитрилами **2**, которые являются удобными и более доступными по сравнению с этилфенилпропиолатом, ранее использовавшийся нами для получения гетероаннелированных 1,3-тиазинов на основе бициклических систем **1** [2]. Оказалось, что селективность данной циклоконденсации зависела от природы заместителей в мостиковых положениях соединений **1** и селективно приводила в каждом случае к одной из двух региоизомерных гетероциклических систем имидазотиазино[3,2-*b*]триазина **3** (для R²=Ar) или имидазотиазино[2,3-*c*]триазинов **4** (для R²=H).

Схема



X=O, S; Y=O, NH; R¹=Me, Et; R²=Me, Et, Ph; R³=H, Ph, 4-MeOC₆H₄;
Ar(Het)=Ph, 4-EtOC₆H₄, 4-BrC₆H₄, 4-O₂NC₆H₄, тиофен-2-ил и др.

Исследование противоопухолевой активности полученных имидазотиазинотриазинов позволило выявить структуры, обладающие высокой цитотоксичностью в отношении ряда испытанных опухолевых клеток (СТ26, ЕМТ6 и SW620 IC₅₀ 2–16 мкмоль/л). Исследование влияния испытуемых соединений на клеточный цикл показало, что большая часть клеток останавливает деление фазе G2-М и гибнет через апоптоз.

Литература

1. L. M. Lima, B. N. M. da Silva, G. Barbosa, E. J. Barreiro, *Eur. J. Med. Chem.* 2020, **208**, 112829.
2. D. B. Vinogradov, A. N. Izmet'ev, A. N. Kravchenko, N. G. Kolotyrkina, G. A. Gazieva, *J. Heterocycl. Chem.* 2024, **61**, 137.

МОНО-, БИС- И ГЕТЕРОДИЗАМЕЩЕННЫХ 2,9-ДИАМИНОФЕНАНТРОЛИНЫ: СИНТЕЗ И КООРДИНАЦИОННАЯ ХИМИЯ

Исомиддинов Ж.К., Музалевский В.М., Лысенко К.А., Ненайденко В.Г.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.
e-mail: javohirmirzo7375@mail.ru

Разработана стратегия селективного синтеза новых моно-, бис- и гетеродизамещенных аминифенантролинов¹ на основе нуклеофильного замещения хлора в 2,9-дихлор-1,10-фенантролине. Получена библиотека лигандов, представляющих интерес для координационной химии (Схема 1). Синтезированы их комплексы (Рисунок 1) с рядом d- и f-элементов, например Ni(NO₃)₂, Cd(NO₃)₂, AgNO₃, HgCl₂, где детально исследована координация связывания. Строение полученных комплексов подтверждено ЯМР, ИК, МС, РСА; метод открывает доступ к хелаторам для экстракции катионов металлов и катализа.

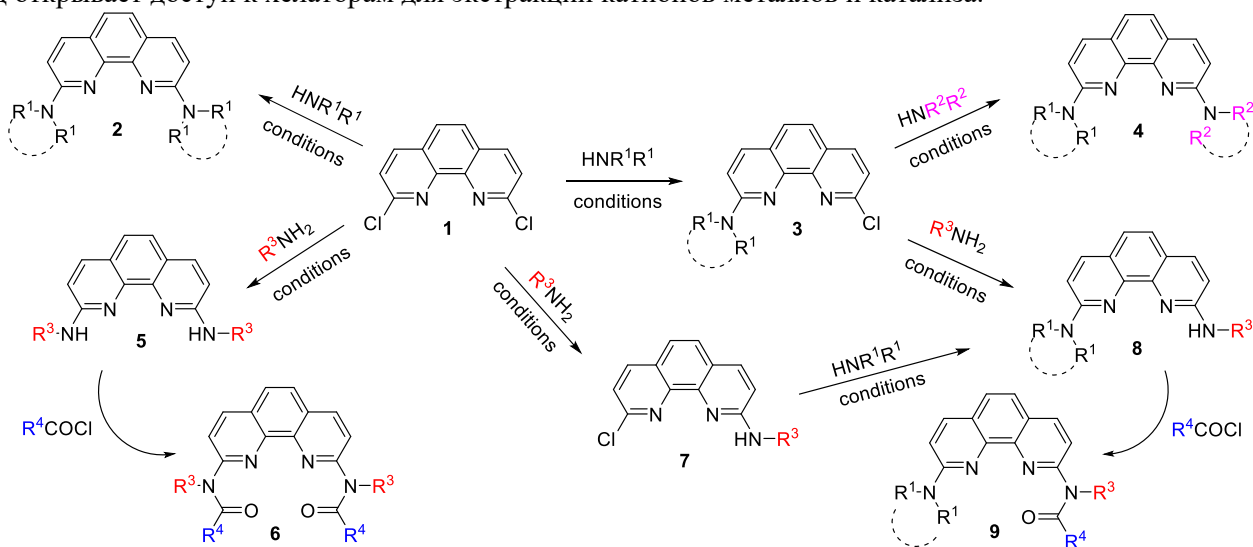


Схема 1.

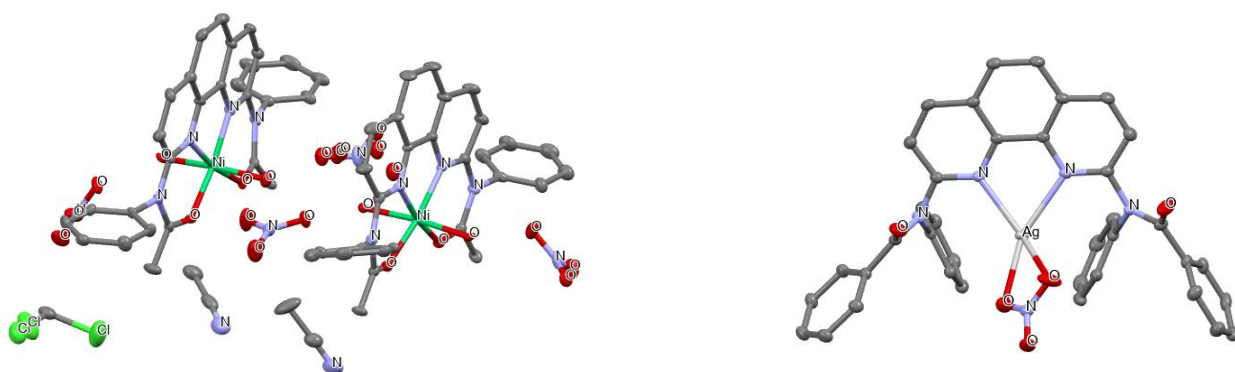


Рисунок 1.

Литература

1. V. M. Muzalevskiy, J. K. Isomiddinov, K. A. Lyssenko, V. G. Nenajdenko, *Russ Chem. Bull.* in print

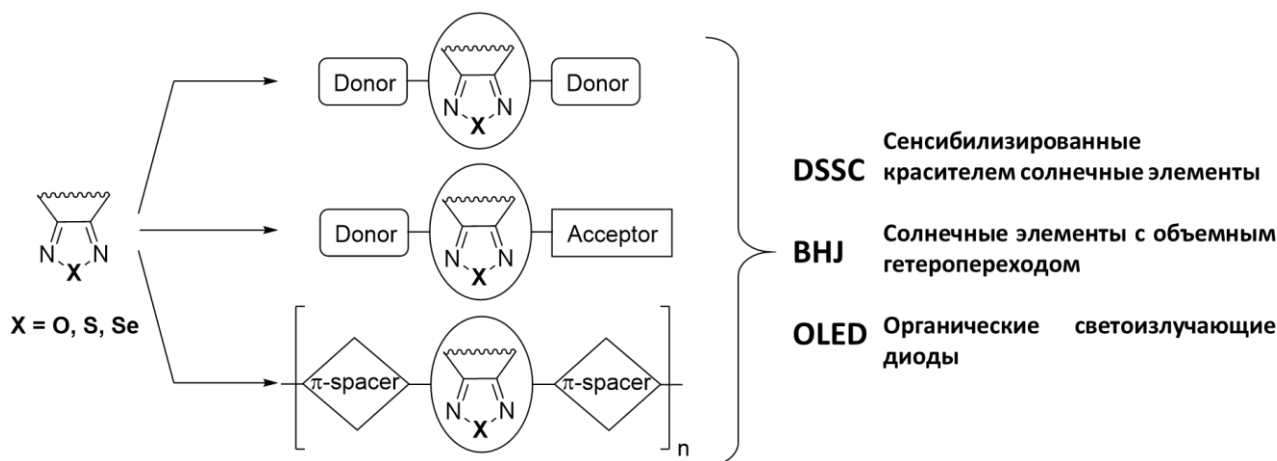
КОНДЕНСИРОВАННЫЕ 1,2,5-ХАЛЬКОГЕНАДИАЗОЛЫ КАК ПРЕДШЕСТВЕННИКИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ И ФОТОНИКИ

Князева Е.А., Ракитин О.А.

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

Производные электронодефицитных гетероциклов зарекомендовали себя в качестве компонентов функциональных материалов с интересными электронными и оптическими свойствами (люминесценцией, ферромагнетизмом, сверхпроводимостью, жидкокристаллическими свойствами и др.). В частности, 1,2,5-халькогенадиазолы, конденсированные с другими, особенно электроноакцепторными, гетероциклами, демонстрируют высокое сродство к электрону, благодаря чему находят применение в качестве парамагнитных и электропроводящих структурных блоков функциональных материалов для фотоники и спинтроники [1].

Нами разработаны синтетические подходы к широкому спектру новых гетероциклических структур, сочетание которых с донорными, акцепторными или мостиковыми фрагментами в различных комбинациях открыло подход к эффективным функциональным материалам. На основе синтезированных молекул были сконструированы лабораторные прототипы таких устройств как сенсibilизированные красителем солнечные элементы (DSSC), солнечные элементы с объемным гетеропереходом (BHJ), а также органические светоизлучающие диоды (OLED). Исследованы основные характеристики указанных устройств, в результате чего установлены некоторые фундаментальные закономерности «структура-свойство» [2-3].



Анализ библиотеки синтезированных соединений и фотовольтаических устройств на их основе позволяет проводить направленный подбор донорных, акцепторных, мостиковых и электронодефицитных гетероциклических фрагментов, а также оптимизировать порядок их связывания для целенаправленного получения материалов с заданными свойствами.

Литература

1. O. A. Rakitin, *Comprehensive Heterocyclic Chemistry IV*, 2022; 5, 371.
2. Z. Li, C. Jiang, X. Chen, G. Song, X. Wan, B. Kan, T. Duanad, E. A. Knyazeva, O. A. Rakitin, Y. Chen, *J. Mater. Chem. C*, 2023, **11**, 6920.
3. A. Leventis, T. N. Chmovzh, E. A. Knyazeva, Y. Han, M. Heeney, O. A. Rakitin, H. Bronstein, *Polym. Chem.*, 2020, **11**, 581.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 24-43-00022).

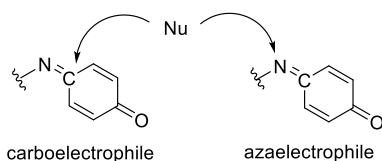
ДВОЙСТВЕННАЯ РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ИМИНОГРУППЫ N-АРИЛХИНОНИМИНОВ

Колодина А.А.^а, Ходыкина Е.С.^а, Стегленко Д.В.^а, Бородин Г.С.^а, Демидов О.П.^б

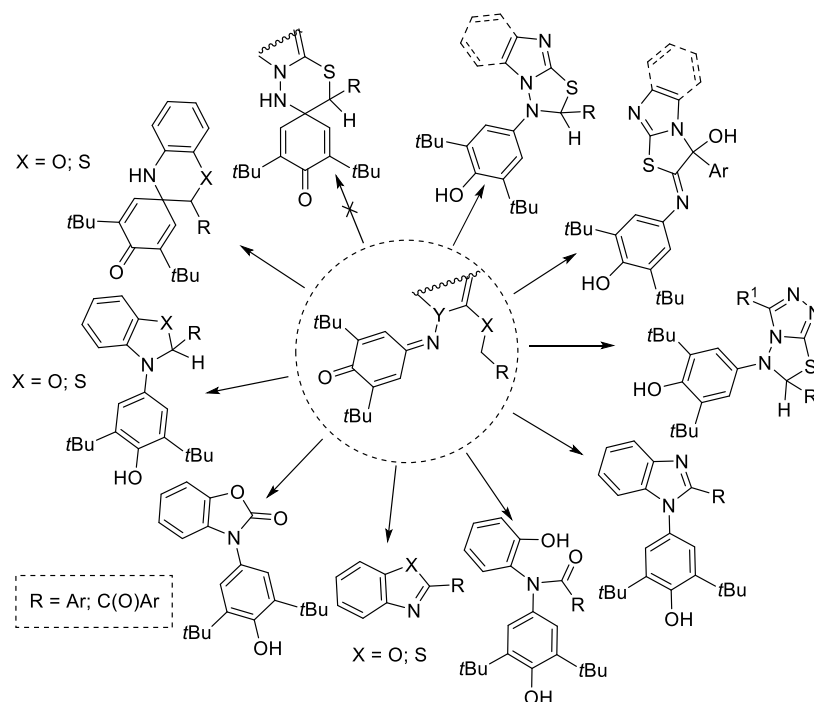
^аЮжный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физической и органической химии, Ростов-на-Дону, Россия.

^бСеверо-Кавказский федеральный университет, химический факультет, Ставрополь, Россия.
e-mail: akolodina@sfedu.ru

Особенности строения азометинового фрагмента или другие особые условия могут приводить к обращению реакционной способности иминогруппы («umprölung»), когда наблюдается азафильное присоединение нуклеофила. Примером проявления такой двойственной природы иминогруппы являются реакции N-арилхинониминнов [1,2].



Двойственная реакционная способность хинониминной группы была продемонстрирована нами при изучении циклизации орто-O(S,N)-алкилзамещенных N-арил- и N-гетарилхинониминнов в различных условиях.



Литература

1. L.Y. Ukhin, K.Yu. Suponitskii, L.V. Belousova, T.N. Gribova Russ. Chem. Bull., 2009, **58**, 940.
2. L.M. Mori-Quiroz, Ch.G. Comadoll, J.E. Super, M.D. Clift Org. Lett., 2021, **23**, 7008.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 25-23-00405, <https://rscf.ru/project/25-23-00405/>). место реализации гранта – Южный федеральный университет.

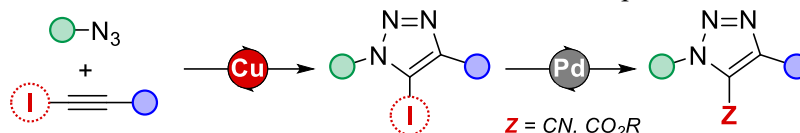
ИОДТРИАЗОЛЫ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ИНТЕРМЕДИАТЫ В ХИМИИ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Котовщиков Ю.Н.^а, Латышев Г.В.^а, Лукашев Н.В.^а, Белецкая И.П.^а

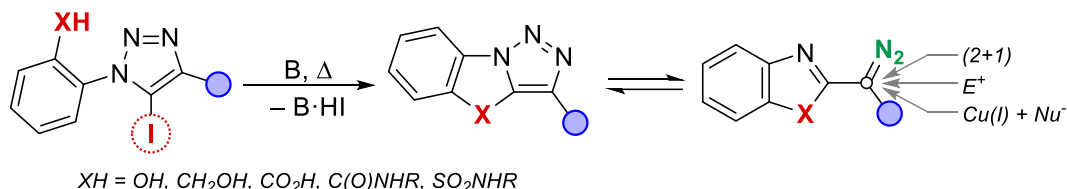
^аМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.
e-mail: yuri-chem@mail.ru

Медь-катализируемое (3+2)-циклоприсоединение азидов к терминальным алкинам является наиболее универсальным подходом к 1,4-дизамещённым 1,2,3-триазолам. В аналогичную реакцию вступают также 1-иодалкины, что позволяет легко синтезировать 5-иодпроизводные этих гетероциклов. Возможность последующего замещения галогена открывает удобную стратегию для региоселективной сборки полностью замещённых 1,2,3-триазолов, которые часто труднодоступны альтернативными методами.

В данной работе предложены новые подходы для модификации 5-иод-1,2,3-триазолов. С помощью палладиевого катализа осуществлена замена галогена на нитрил [1], а также сложноэфирную группу в условиях карбонилирования [2]. Дальнейшие превращения функциональных групп позволяют получать и другие производные триазолов, в том числе, создавая системы конденсированных гетероциклов.



Наличие в структуре подходящей нуклеофильной группы позволяет достаточно легко осуществлять некаталитическое замещение иода в триазольном кольце. Нам удалось показать, что данная синтетическая стратегия является весьма общей и может быть применена к широкому кругу нуклеофильных групп, среди которых спирты, фенолы, карбоновые кислоты, сульфонамиды и карбоксамиды. В ряде случаев аннелирование дополнительного цикла может способствовать изомеризации 1,2,3-триазола в диазоимин. Особенно ярко это проявляется при формировании пятичленного оксазольного цикла, что делает 2-(5-иодтриазолил)фенолы удобными стабильными прекурсорами соответствующих диазосоединений [3, 4]. Перехват диазогруппы можно осуществлять *in situ* различными реагентами, создавая новые связи C–N, C–S и C–C.



Литература

1. R. N. Galashev, G. V. Latyshev, Y. N. Kotovshchikov, N. V. Lukashev, I. P. Beletskaya *Org. Biomol. Chem.* 2025, **23**, 4725.
2. Y. N. Kotovshchikov, G. V. Latyshev, I. P. Beletskaya, N. V. Lukashev *Synthesis* 2018, **50**, 1926.
3. Y. N. Kotovshchikov, G. V. Latyshev, M. A. Navasardyan, D. A. Erzunov, I. P. Beletskaya, N. V. Lukashev *Org. Lett.* 2018, **20**, 4467.
4. X. A. Barashkova, A. G. Gevondian, G. V. Latyshev, Y. N. Kotovshchikov, S. I. Bezzubov, N. V. Lukashev, I. P. Beletskaya *Org. Lett.* 2024, **26**, 9625.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-73-10043, <https://rscf.ru/project/23-73-10043/>).

ДИЗАЙН И СИНТЕЗ ПРОЛЕКАРСТВ Pt(IV) НА ОСНОВЕ BODIPY И ЦИАНИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ ДЛЯ ФОТОАКТИВИРУЕМОЙ ХИМИОТЕРАПИИ, ФОТОТЕРМАЛЬНОЙ И ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ

Красновская О.О.,^а Спектор Д.В.,^а Жарова А.О.,^а Быкусов В.В.,^а Кузьмичев И.А.,^б Чмелюк Н.С.,^б Лазарева П.А.,^б Абакумов М.А.,^б Акасов Р.А.,^в Исаева Ю.А.,^в Степанов М.Е.,^в Бунин Д.А.,^г Белоглазкина Е.К.^а

^аМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

^бНациональный исследовательский технологический университет (МИСЦ), Ленинский пр., 4, Москва, 119049, Россия

^вМосковский государственный педагогический университет, Малая Пироговская ул. 1, Москва, 119435, Россия

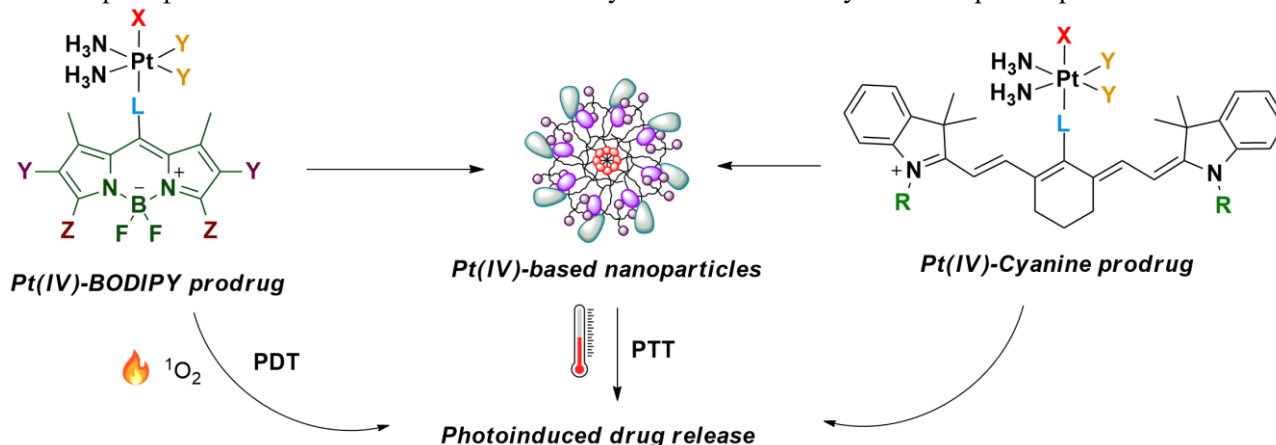
^гИнститут физической химии и электрохимии имени А. Н. Фрумкина РАН,

Ленинский пр., 31/4, Москва, 119071, Россия

e-mail: krasnovskayao@gmail.com

Дизайн и синтез фотоактивируемых пролекарств Pt(IV) является новым подходом к преодолению низкой селективности и высокой токсичности химиотерапии на основе препаратов Pt(II) [1]. Пролекарство Pt(IV) содержащее фотопоглотитель в аксиальном положении способно к контролируемому фотовысвобождению препарата Pt(II) под действием облучения. Варьирование природы и структуры фотопоглотителя позволяет получать пролекарства, обладающие фотодинамической активностью, а также способные к агрегации с образованием наночастиц, проявляющих фототермальную активность [2].

Нами разработаны пролекарства Pt(IV) с BODIPY и цианиновыми красителями в аксиальном положении, способные к контролируемому фотовысвобождению цисплатина и генерации АФК; а также наночастицы на основе амфифильных пролекарств Pt(IV), проявляющие значительную ФТТ активность *in vitro* и *in vivo*. Разработаны оптимальные синтетические подходы к получению фотоактивируемых пролекарств с желаемыми свойствами. Показано, что варьирование структуры фотопоглотителя, линкера между ядром Pt(IV) оказывает влияние на фотофизические свойства и биологическую активность получаемых пролекарств.



Литература

1. D. Spector, A. Zharova., V. Bykusov, G. Karetnikov, E. Beloglazkina, O. Krasnovskaya. *Coord. Chem. Rev.*, 2025, **216808**.
2. D. Spector, A. Zharova., V. Bykusov, E. Beloglazkina, O. Krasnovskaya et al. *ACS Appl. Nano Mater.* 2024, 7, 22, **25603–25618**

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 22-15-00182-П).

СИНТЕЗ НОВЫХ ПОЛИАЗОТИСТЫХ ИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ТЕТРАЗИНА

Кряж В.В.^а, Муравьев Н.В.^б, Ферштат Л.Л.^а^аИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия
119991, Россия, г. Москва, Ленинский проспект, д. 47^бФедеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Россия
119334, Россия, г. Москва, улица Косыгина, 4к1
email: vkryazh@gmail.com

1,2,4,5-Тетразин является тривиальным примером гетероциклической молекулярной системы, исследуемой в различных направлениях химии. Уникальные химические свойства вкупе с высокими значениями стабильности производных тетразина побуждают научное сообщество сохранять фокус внимания на данной системе, особенно при разработке новых энергонасыщенных материалов. Однако существующие знания все еще можно назвать недостаточными, а глубину понимания данной области химии локальной, несмотря на растущее количество исследований.

В связи с этим, данная работа посвящена разработке подходов к получению новых производных 1,2,4,5-тетразина с различными заместителями, позволяющими применять их в качестве высокоэнергетических органических оснований, способных дополнительно стабилизировать чувствительные системы. Рассмотренные методы подразумевают введение в структуру молекулы новых групп, аффинных к кислым протонам среды, а также синтез различных ионных соединений с модельными противоионами.

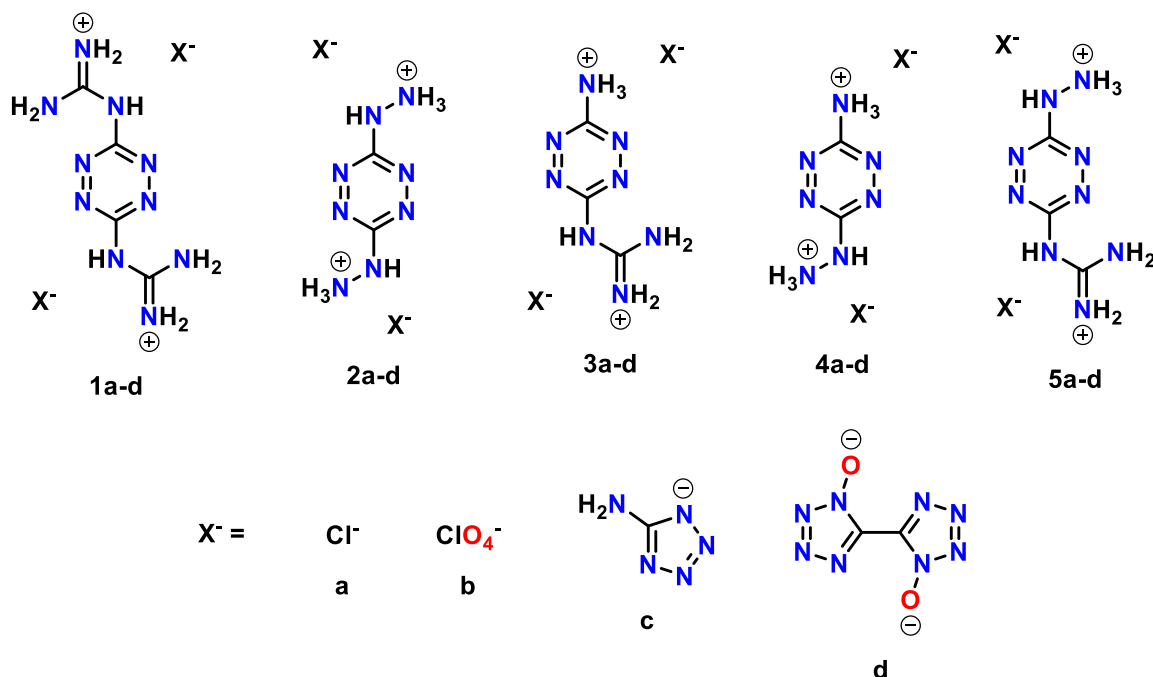


Схема 1. Ионные соединения на основе тетразинового ядра

Литература

1. N. V. Muravyev, L.L. Fershtat and Q. Zhang, *Chem. Eng. J.*, 2024, **486**, 150410.
2. L.L. Fershtat, *FirePhysChem*, 2023, **3**, 78-87.

ИМИДАЗОЛИН-2-ОНЫ – АМБИФИЛЬНЫЕ РЕАГЕНТЫ В СИНТЕЗЕ (ПОЛИ)ЦИКЛИЧЕСКИХ МОЧЕВИН

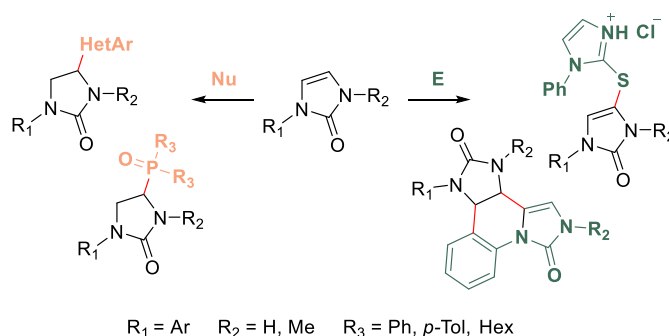
**Кузнецова Е.А.^а, Рысаева Р.Р.^б, Смолобочкин А.В.^а, Газизов А.С.^а,
Бурилов А.Р.^а, Пудовик М.А.^а**

^а Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,
420029, Россия, Казань, Академика Арбузова, 8

^б Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008, Россия, г. Казань,
ул. Кремлевская, д.18, корп. 1
e-mail: wunschpuuunsch@yandex.ru

Одной из задач современной органической химии является создание новых типов лекарственных препаратов. Обширным классом гетероциклических соединений являются циклические мочевины, представляющие значительный интерес в первую очередь, за счёт своей биологической активности. С этой точки зрения, перспективными исходными соединениями для синтеза производных (поли)циклических мочевины являются имидазолин-2-оны, имеющие в своем составе как эндоциклический мочевиновый фрагмент, так и реакционноспособную кратную связь, предполагающую широкие возможности их функционализации.

В настоящей работе собраны результаты наших исследований, направленных на изучение взаимодействия *N*-замещённых имидазолин-2-онов с широким кругом нуклеофильных и электрофильных реагентов и разработку подходов к синтезу новых циклических и полициклических мочевины, в том числе неизвестных ранее типов [1-3].

**Литература**

1. A.S. Gazizov, Smolobochkin A. V., Kuznetsova E.A., etc. *Molecules*,. 2021, **26**, 4432.
2. Kuznetsova E.A., Smolobochkin A.V., Rizbayeva T.S., etc. *Org. Biomol. Chem.*, 2022, **20**, 5515.
3. Kuznetsova E.A., Rysaeva R.R., Smolobochkin A.V., etc. *Org. Lett.*, 2024, **26**, 4323.

СИНТЕТИЧЕСКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ 5-МЕТИЛИДЕН-2-ХАЛЬКОГЕНГИДАНТОИНОВ В РЕАКЦИЯХ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

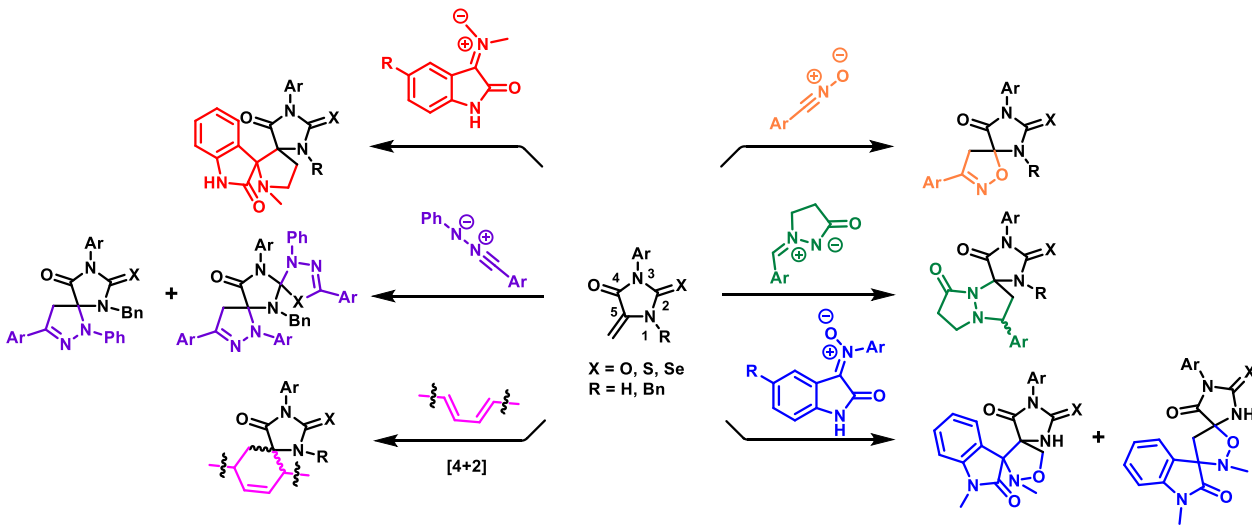
Кукушкин М.Е.^а, Филькина М.Е.^а, Петрова Ю.В.^{а,б}

*^aМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия;*

⁶РУДН им. Патриса Лумумбы, Химический факультет, Москва, Россия.
e-mail: kukmevg@gmail.com

Реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения и Дильса-Альдера являются одними из мощнейших методов усложнения углеродного скелета для проведения которых необходимы субстраты, содержащие как кратные связи углерод-углерод, так и углерод-гетероатом. Гидантоины и их производные являются удобным структурным ядром, модификацией которого можно добиться создания экзоциклических связей C=C, C=N, C=S, C=Se, где каждая, при грамотном подборе условий, может служить диполярофильным центром в реакциях (3+2)-циклоприсоединения.

Несмотря относительную известность гидантоина и его производных, данные гетероциклы практически не исследованы в реакциях циклоприсоединения. Рассматриваемые здесь 5-метилен-2-халькогенгидантоины особенно интересны в данном контексте: ввиду наличия активной и пространственно доступной связи C=C, они способны присоединять большинство известных 1,3-диполей и вступать в реакцию [4+2]-циклоприсоединения, что во многих случаях крайне затруднено для три- и тетразамещенных кратных связей. Более того, варьирование атома халькогена может влиять на хемо- и даже региоселективность некоторых процессов, при этом немаловажную роль оказывает наличие или отсутствие заместителя при атоме N(1) гетероцикла, что имеет принципиальное значение в случае 1,3-диполей генерируемых *in situ* под действием оснований.



Литература

1. Kukushkin, M. E. et al. *R. Soc. Open Sci.* **2022**, 9 (3), 211967.
2. Filkina Maria E. et al. *Int. J. Mol. Sci.* **2023**, 24(2), 1289.
3. Shybanov, D. E. et al. *Int. J. Mol. Sci.* **2023**, 24 (5), 5037.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 24-23-00173).

НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ЗАМЕЩЕННЫХ АЗЕПИН-2-ОНОВ

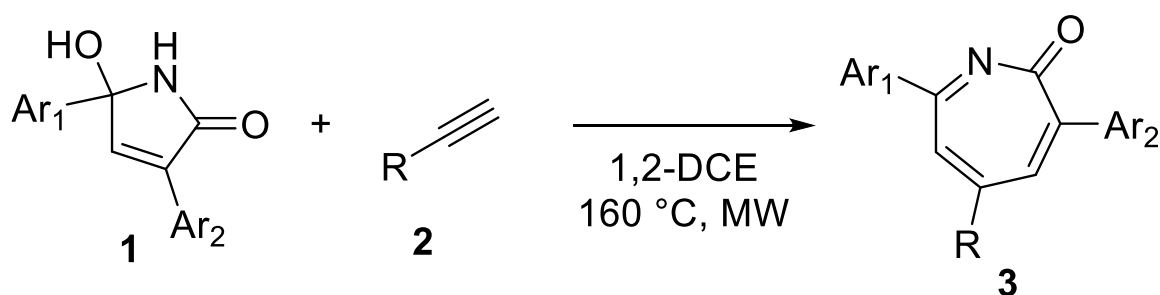
Курликов А.Э., Барболин А.П., Куренков И.А., Аксенов Н.А.

Северо-Кавказский Федеральный Университет,
г. Ставрополь, ул. Пушкина 1, 355017, Российская Федерация;
e-mail: vip.kurlikov@mail.ru

В рамках работы по изучению реакционной способности 3,5-диарил-5-гидроксипиррол-2-онов, нами была обнаружена возможность расширения 5-гидроксипиррольного цикла до азепинового. Взаимодействие различных замещенных пиррол-2-онов **1** с терминальными алкинами **2** приводит к образованию новых 3,5,7-замещенных азепин-2-онов **3**.

На данный момент синтезировано большое число аннелированных азепинов проявляющих широкий спектр биологической активности. Мы, в свою очередь, предлагаем способ синтеза новых неаннелированных азепин-2-онов с потенциальной биологической активностью.

Схема 1.



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-73-10027).

СОЗДАНИЕ ТЕРМОСТАБИЛЬНЫХ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАДИАЗОЛА

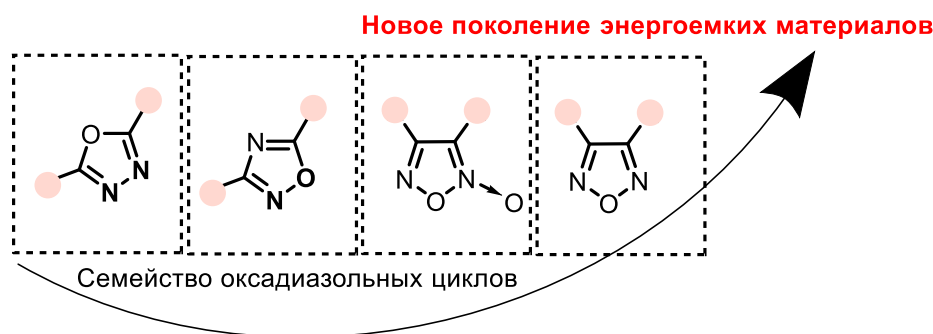
Ларин А.А., Ферштат Л.Л.

ФГБУН Институт Органической Химии им. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47
e-mail: rob3@mail.ru

На современном этапе научно-технического прогресса возникает необходимость в постоянном поиске новых материалов с улучшенными свойствами. Особенно актуально это в сфере создания органических материалов для нелинейной оптики, солнечных батарей и устройств хранения данных, так и для функциональных энергонасыщенных материалов с большим содержанием азота и кислорода [1].

Полиазотные гетероциклические каркасы сохраняют свои лидирующие позиции в качестве ценных строительных блоков в материаловедении, особенно при разработке низкомолекулярных энергетических материалов. Однако поиск более сбалансированных комбинаций напрямую связанных гетероциклических ядер далеко не исчерпан и направлен на создание идеально сбалансированных высокоэнергетических веществ [2,3].

В настоящей работе нами предложены эффективные подходы к синтезу различных полиазотных энергоемких производных оксадиазолов, включая разнообразные комбинации 1,2,4-оксадиазольного, 1,2,5-оксадиазольного и его *N*-оксида (фуроксановый цикл). Эти подходы включают в себя синтез полициклических соединений из доступных реагентов с эксплозофорными заместителями, а также определение физико-химических параметров синтезированных образцов.

**Литература**

1. T. E. Khoranyan, A. A. Larin, K. Y. Suponitsky, I. V. Ananyev, I. N. Melnikov, E. K. Kosareva, N. V. Muravyev, I. L. Dalinger, A. N. Pivkina, L. L. Fershtat. ACS Appl. Mater. Interfaces **2024**, 53972– 53979
2. A.A. Larin, A.V. Shaferov, M.A. Epishina, I.N. Melnikov, N.V. Muravyev, I.V. Ananyev, L.L. Fershtat, N.N. Makhova ACS Appl. Energy Mater., **2020**, 3, 7764-7771
3. A.A. Larin, D.D. Degtyarev, I.V. Ananyev, A.N. Pivkina, L.L. Fershtat Chem. Eng.J., **2023**, 470, 144144

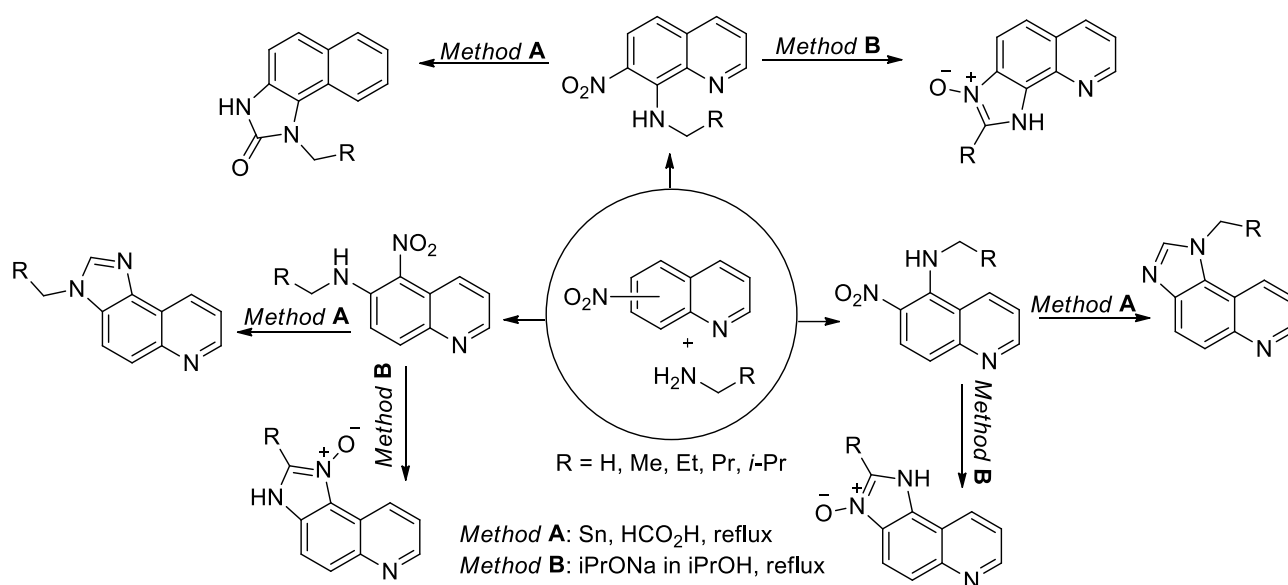
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-43-00090).

ОРТО-АЛКИЛАМИНОПРОИЗВОДНЫЕ НИТРОХИНОЛИНОВ, КАК УДОБНАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ СИНТЕЗА ИМИДАЗОХИНОЛИНОВ.

Ларин А.Н., Демидов О.П., Авакян Е.К., Побединская Д.Ю., Боровлева А.А.,
Ермоленко А.П., Боровлев И.В.

Северо-Кавказский федеральный университет,
ул. Пушкина, 1а, Ставрополь, 355009, Россия
e-mail: alexlarin1299@gmail.com

Ранее в нашей работе был представлен новый метод селективного синтеза 4-, 5-, 6- или 8-алкиламинопроизводных хинолина и 8-алкиламиноизохинолина. Метод заключается в прямом окислительном замещении водорода алкиламиногруппой в молекулах 3(5,6,7,8)-нитрохинолинов и 5-нитроизохинолина в водной среде. Примечательно, что региоселективность этих реакций определяется исключительно нитрогруппой субстрата. Этот метод отличается простотой и масштабируемостью [1]. Полученные орто-алкиламинопроизводные нитрохинолинов стали удобной платформой для синтеза имидазохинолинов,



Литература

1. A.N. Larin, A.A. Borovleva, O.P. Demidov, E.K. Avakyan, A.A. Zubenko, D.Y. Pobedinskaya, A.P. Ermolenko, S.E. Kolosov, I.V. Borovlev Asian J. Org. Chem. – 2024. – Reg. 202400490.

Исследование финансировалось за счет гранта Российского научного фонда 24-23-00300, <https://rscf.ru/project/24-23-00300/>.

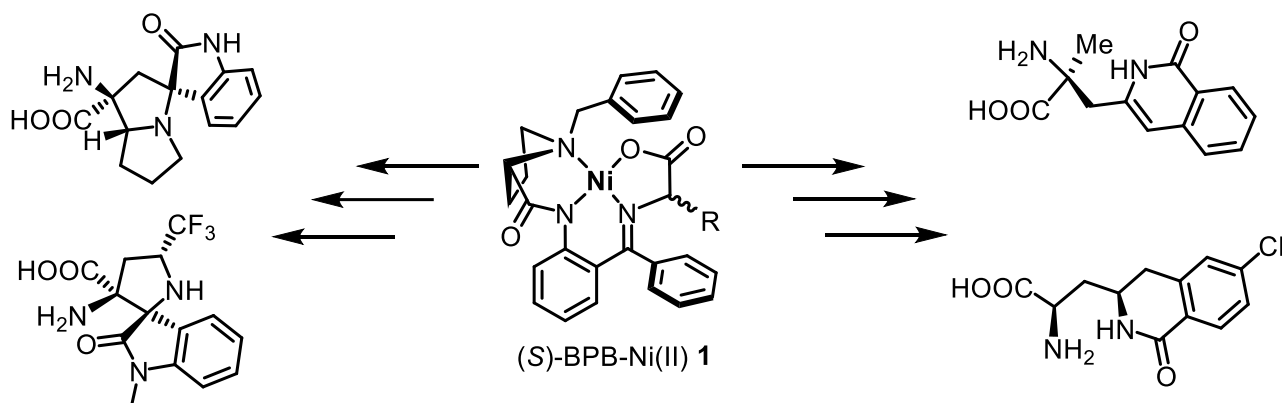
МЕТАЛЛ-ТЕМПЛАТНЫЙ АСИММЕТРИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ТРУДНОДОСТУПНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ α -АМИНОКИСЛОТ

Ларионов В.А., Гугкаева З.Т., Столетова Н.В., Арсенов М.А., Логинов Д.А., Малеев В.И.

Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
 Российской Академии Наук (ИНЭОС РАН), Москва, Россия.
 e-mail: larionov@ineos.ac.ru

Энантиомерно чистые α -аминокислоты (АК) небелкового или неприродного строения являются перспективными объектами для биохимических исследований и фармацевтической промышленности. Они широко применяются при создании новых лекарственных средств, а также для изменения структуры пептидов и белков. Поэтому одной из главных задач современной органической химии является разработка эффективных методов синтеза новых энантиомерно чистых α -аминокислот с различными фармакоформными группами[1].

В рамках наших исследований были разработаны новые методы асимметрического синтеза труднодоступных гетероциклических α -аминокислот небелковой природы, основанные на металл-темплатном подходе. В качестве универсального исходного соединения использовались хиральные комплексы никеля(II) **1**. Благодаря целенаправленной модификации лигандного окружения с помощью реакций циклоприсоединения и С-Н функционализации, удалось получить ряд α -аминокислот, содержащих 3-спиропирролидин оксиндольное[2], CF_3 -замещенное 3,2'-пирролидинил спирооксиндольное[3], изохинолоновое[4] и 3,4-дигидроизохинолоновое ядра[5]. Высокий диастереоселективный контроль достигался за счет наличия стереогенного центра в лигандном окружении исходного комплекса.



Литература

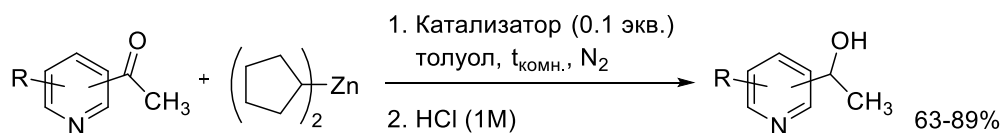
1. V. A. Larionov, N. V. Stoletova, V. I. Maleev, *Adv. Synth. Catal.*, 2020, **362**, 4325.
2. Z. T. Gugkaeva, M. V. Panova, A. F. Smol'yakov, M. G. Medvedev, A. T. Tsaloiev, I. A. Godovikov, V. I. Maleev, V. A. Larionov, *Adv. Synth. Catal.*, 2022, **364**, 2395.
3. Z. T. Gugkaeva, M. P. Stukalova, A. F. Smol'yakov, A. T. Tsaloiev, V. I. Maleev, V. A. Larionov, *Adv. Synth. Catal.*, 2024, **366**, 1205.
4. M. A. Arsenov, N. V. Stoletova, T. F. Savel'yeva, A. F. Smol'yakov, V. I. Maleev, D. A. Loginov, V. A. Larionov, *Org. Biomol. Chem.*, 2022, **20**, 9385.
5. M. A. Arsenov, N. V. Stoletova, A. F. Smol'yakov, T. F. Savel'yeva, V. I. Maleev, D. A. Loginov, V. A. Larionov, *Org. Biomol. Chem.*, 2023, **21**, 9143.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ, проект № 23-73-00073.

ПОИСК НОВЫХ СИСТЕМ СПОНТАННОГО ВОЗНИКНОВЕНИЯ ХИРАЛЬНОСТИ:
РЕАКЦИИ КАРБОНИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ДИЦИКЛОПЕНТИЛЦИНКОМЛатыпова Л.З.^a, Сайгитбаталова Е.Ш.^a, Михайлов О.А.^b,
Курбангалиева А.Р.^a, Гриднев И.Д.^b^aКазанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казань, Россия.^bИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия.e-mail: llatypov@kpfu.ru

Селективность химических превращений и структурные причины, приводящие к ней, находятся в центре внимания современных исследований в области органической и металлоорганической химии. В настоящее время известен единственный пример эффективного спонтанного возникновения хиральности – это реакция Соаи, открытая в 1995 году японским ученым Кенсо Соаи [1]. Механизм спонтанного возникновения хиральности остается до сих пор не изученным, а соединения со структурой, заметно отличающейся от известных субстратов Соаи, не найдены. Данная работа посвящена поиску аналогов реакции Соаи.

Изучено взаимодействие алифатических и ароматических альдегидов и кетонов с дициклопентилцинком в отсутствие и в присутствии хирального катализатора. В отличие от реакции Соаи, где основным процессом является алкилирование цинкорганическим реагентом, результатом исследованных нами реакций является восстановление. Показано, что альдегиды восстанавливаются дициклопентилцинком до соответствующих первичных спиртов [2]. Циклогексанон, ацетофенон, 3-ацетилпиррол и 3-ацетилиндол инертны к дициклопентилцинку, тогда как региоизомерные пиридинилкетоны легко реагировали, образуя вторичные спирты с хорошими выходами [2,3]. При проведении реакций пиридинилкетонов с дициклопентилцинком в присутствии каталитических количеств хирального аминспирта лишь в случае 3-ацетилпиридина наблюдали образование спирта с высоким энантиомерным выходом. Кроме того, в реакции 3-ацетилпиридина с дициклопентилцинком обнаружен автокатализ, способный амплифицировать энантиомерный избыток продукта.



Квантово-химические расчеты и изучение структур переходных состояний в реакциях восстановления 2-, 3- и 4-ацетилпиридинов дициклопентилцинком [2,3] свидетельствуют о синхронном преобразовании через шестичленное переходное состояние. Наименьший активационный барьер был рассчитан для восстановления 3-ацетилпиридина. На примере 3-ацетилпиридина показана предпочтительность образования S-стереоизомера.

Литература

1. K. Soai, T. Shibata, H. Morioka, K. Choji *Nature*, 1995, **378**, 767.
2. E. S. Saigibatbalova, L. Z. Latypova, A. A. Zagidullin, A. R. Kurbanalieva, I. D. Gridnev *Int. J. Mol. Sci.*, 2023, **24**, 17048.
3. Л. З. Латыпова, Е. Ш. Сайгитбаталова, О. А. Михайлов, Н. С. Чарушин, А. А. Загидуллин, А. Р. Курбангалиева, И. Д. Гриднев *Изв. АН. Сер. хим.* 2025, **74**, 755.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00275-П).

РЕАКЦИЯ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ НИТРОНОВ БИСПИДИНА КАК СТРАТЕГИЯ СИНТЕЗА НОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Ликликадзе Г.К., Медведько А.В., Вацадзе С.З.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия.

e-mail: liklikot@mail.ru

Среди природных алкалоидов можно встретить группу структур, содержащих биспидиновую систему с примыкающими к ней боковыми циклическими фрагментами [1]. Данные соединения демонстрируют различные виды биологической активности [2], многие из них показывают анальгетические, антиаритмические, противовирусные и др. свойства, и таким образом, представляют особый интерес в отношении синтеза и модификации (рис. 1). С другой стороны, известно, что изоксазолидины и изоксазолины являются фармакофорными фрагментами многих биологически активных соединений [3].



Рисунок 1. Примеры природных алкалоидов, содержащих биспидин

В представленной работе мы объединили два данных структурных мотива и разработали метод синтеза нового типа уникальных конденсированных гетероциклов на основе реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения. Для этого был оптимизирован синтез соответствующего нитрона и изучены особенности регио- и стереоселективности его циклоприсоединения в реакциях с разнообразными диполярофилами (алкенами и алкинами). Таким образом, было показано, что разработанный подход открывает прямой доступ к новым полифункциональным молекулам с потенциальной биологической активностью из легкодоступных олефинов и алкинов (схема 2). Для более чем тридцати новых соединений были установлены относительные конфигурации при помощи метода PCA.

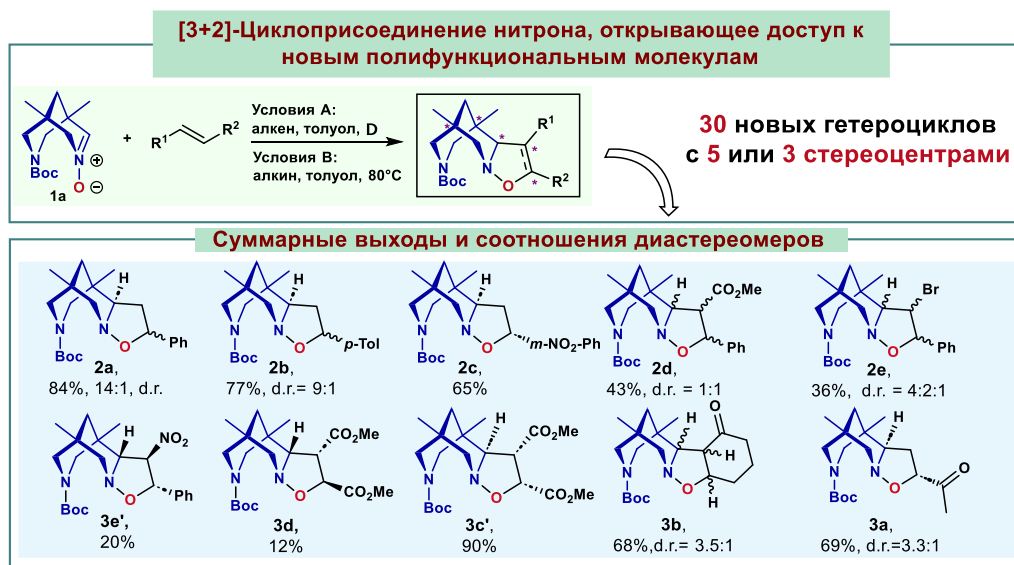


Схема 2. Примеры полученных циклоаддуктов

Литература

1. Michael J.P. *Nat. Prod. Rep.*, 2008, **25**, 139–165.
2. Tutka P., Mróz T., Bednarski J., Styk A., Ognik J., Mosiewicz J., Łuszczki J. *Pharmacol. Reports*, 2013, **65**, 195–200.
3. Berthet M., Cheviet T., Dujardin G., Parrot I., Martinez J. *Chem. Rev.*, 2016, **116**, 15235–15283

НОВЫЙ МЕТОД ПРЕВРАЩЕНИЯ ТРИФТОРМЕТИЛЗАМЕЩЕННЫХ СОПРЯЖЕННЫХ ЕНИНОВ В ДИГИДРОПИРИДИНОНЫ

Лисник Г.Э., Голованов А.А.

Тольяттинский государственный университет,
кафедра «Химическая технология и ресурсосбережение», Тольятти, Россия.
e-mail: suprmagister@gmail.com

Сопряженные енины являются важным прекурсором гетероциклических соединений [1]. Наличие CF₃-группы у тройной связи в енинах обуславливает высокую региоселективность присоединения к ней нуклеофилов. Благодаря этому можно таргетированно получать гетероциклические структуры, содержащие CF₃-фрагмент – соединения с потенциальной биологической активностью [2]. В статье [3] описан синтез азотсодержащих гетероциклов на основе енинов. При нагревании в дифениловом эфире 2-арил-5-(триметилсилил)-1-этоксипент-1-ен-4-ин-3-онов с первичными аминами образуются аминокетоны. Их последующее нагревание приводит к образованию пирролонов. При этом циклизация в дигидропиридины в данной реакции не наблюдается.

При исследовании реакций CF₃-замещенных енинов **1** с нуклеофилами была проведена реакция с аниридином **2a**. Аддукт **3a** был получен с высоким выходом 87 %, затем методом ¹H ЯМР-спектроскопии было обнаружено наличие продукта циклизации – дигидропиридинона **4a**. Этот результат представляет значительный интерес, поскольку дигидропиридины являются ценными синтетическими мишенями и потенциальными источниками биологически активных соединений. Используя поташ в качестве слабого основания и кипячения реакционной смеси в течение 2-3 часов, была получена серия дигидропиридинов **4** с высокими выходами.

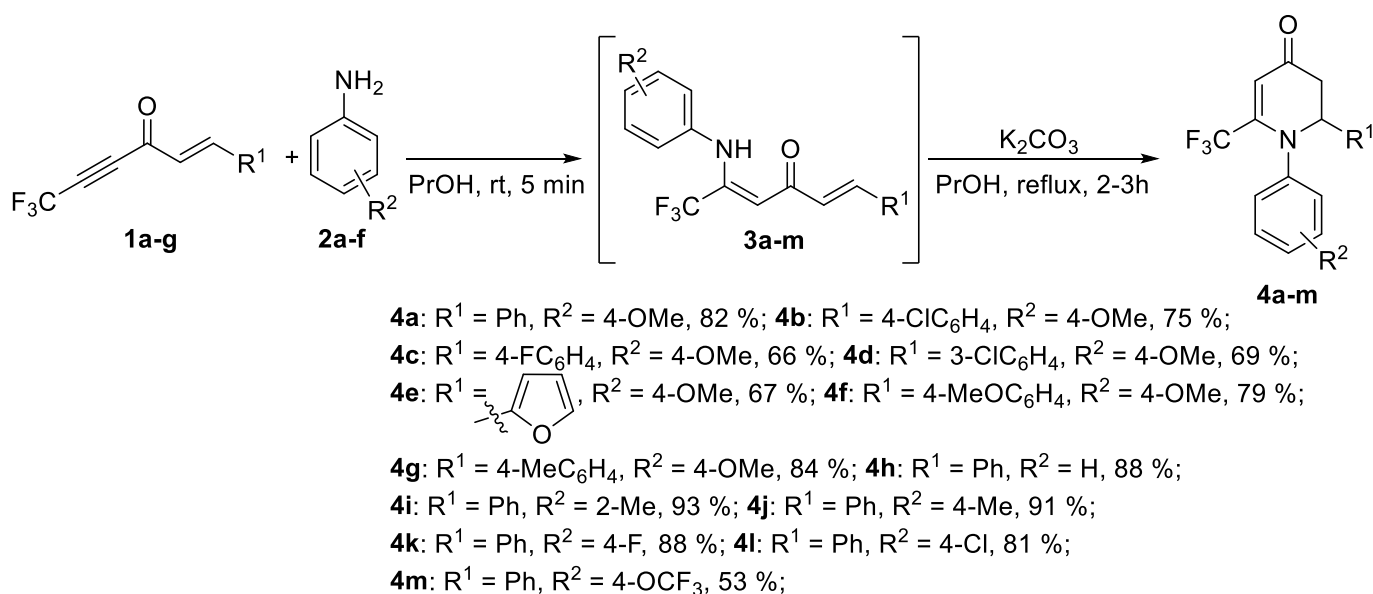


Рисунок 1 – Схема получения CF₃-замещенных дигидропиридинов

Литература

1. А. Голованов, И. Один, С. Злотский *Успехи химии*, 2019, 88, 3, 280-318.
2. H. Yale *J. Med. Chem.*, 1958, 2, 121-133.
3. Golubev P. R., Pankova A. S., Kuznetsov M. A. *The Journal of Organic Chemistry*, 2015, 80, 9, 4545-4552.

СОПРЯЖЕННЫЕ МОЛЕКУЛЫ ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНОГО СТРОЕНИЯ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ И ГИБРИДНОЙ ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ

**Лупоносов Ю.Н.,^а Е.Д. Благодарная,^{а,б} Сухорукова П.К.,^а Калиниченко А.К.^а,
Дядишев И.В.,^а Балакирев Д.О.^а**

^аИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Москва, Россия.

^бФИЦ проблем химической физики и медицинской химии

Российской академии наук, 142432 Черноголовка, Московская обл., Россия

e-mail: luponosov@ispm.ru

Органические (ОСБ) и перовскитные (ПСБ) солнечные батареи привлекают значительный интерес по сравнению с обычными фотоэлектрическими технологиями, основанными на традиционных неорганических полупроводниках, благодаря потенциальной лёгкости, гибкости и полупрозрачности в комбинации с возможностью производства устройств современными и экономичными методами печати. Разработка новых органических полупроводниковых материалов играет ключевую роль в эффективном функционировании как ОСБ, так и ПСБ. Например, появление нового поколения нефуллереновых электроакцепторных материалов (НФА) на основе конденсированных гетероциклических молекул донорно-акцепторного строения позволило осуществить большой прогресс в области ОСБ, что привело к возрастанию КПД с 11% до почти 20% за последние годы. Разработка новых дырочно-транспортных материалов является критически важным вопросом для реализации ПСБ с высокими КПД и долговременностью работы. Основное внимание в докладе будет уделено обсуждению последних результатов в разработке новых эффективных НФА [1-3] на основе как аннелированных, так и неконденсированных молекулярных структур для ОСБ и дырочно-транспортных материалов на основе производных трифениламина с «якорными» группами [4-9]

Литература

1. J. Wan, I. Dyadishchev, Yu. Luponosov, J. Min, et al., *J. Mater. Chem. A.*, 2022, **10**, 17122.
2. E.D. Papkovskaya, D.O. Balakirev, J. Min, Y.N. Luponosov. *Mater. Today Energy*, 2024, **43**, 101591.
3. E.D. Papkovskaya, Ji Wan, D.O. Balakirev, Y.N. Luponosov, et al., *Energies*, 2023, **16**, 3443.
4. D.O. Balakirev, A.L. Mannanov, N.A. Emelianov, P.K. Sukhorukova, Y.N. Luponosov, et al., *Dyes and Pigments*, 2023, **216**, 111343
5. A.F. Latypova, N.A. Emelianov, D.O. Balakirev, P.S. Sukhorukova, N.K. Kalinichenko, Y.N. Luponosov, et al., *ACS Applied Energy Mater.*, 2022, **5**, 5395
5. P.K. Sukhorukova, E.A. Ilicheva, P.A. Gostishchev, L.O. Luchnikov, M.M. Tepliakova, Y.N. Luponosov, et al., *Journal of Power Sources*, 2024, **604**, 234436.
6. Y.N. Luponosov, A.N. Solodukhin, I.A. Chuyko, S.M. Peregudova, S.A. Ponomarenko, et al., *New Journal of Chemistry*, 2022, **46**, 12311.
7. T. S. Le, I. A. Chuyko, L.O. Luchnikov, E.A. Ilicheva, P.K. Sukhorukova, et al., *Solar RRL*, 2024, **8**, 2400437.
8. E.A. Ilicheva, P. K. Sukhorukova, L. O. Luchnikov, D. O. Balakirev, N. S. Saratovsky, A. P. Morozov, P. A. Gostishchev, S. Yu. Yurchuk, A. A. Vasilev, S. S. Kozlov, S. I. Didenko, S. M. Peregudova, D. S. Muratov, Yu. N. Luponosov, D. S. Saranin, *Materials Today Energy* 2025, **47**, 101741
9. D. O. Balakirev, E. D. Blagodarnaia, E.A. Ilicheva, P. K. Sukhorukova, M.V. Zolotov, K. P. Trainov, A. Y. Belyy, I. A. Chuyko, S. M. Peregudova, D. S. Saranin, Yu. N. Luponosov, *Synthetic Metals*, 2025, DOI: 10.1016/j.synthmet.2025.117908

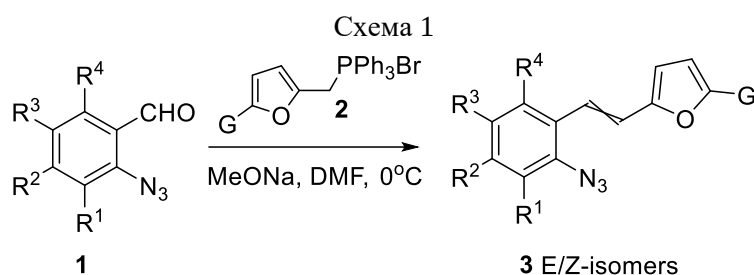
Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (контракт №075-15-2024-532-2 в рамках гранта №075-15-2024-532).

ЗАМЕЩЕННЫЕ 2-(2-АЗИДОСТИРИЛ)ФУРАНЫ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ САНДБЕРГА

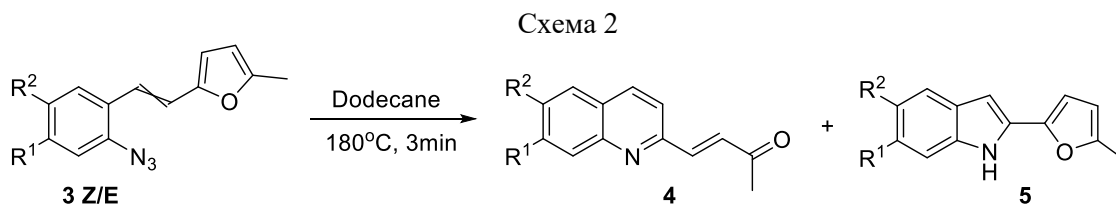
Магкоев Т.Т., Чаликиди П.Н., Абаев В.Т.

Северо-Осетинский Государственный Университет,
ул. Ватутина 46, Владикавказ, 362025, Российская Федерация,
e-mail: magkoevt@inbox.ru

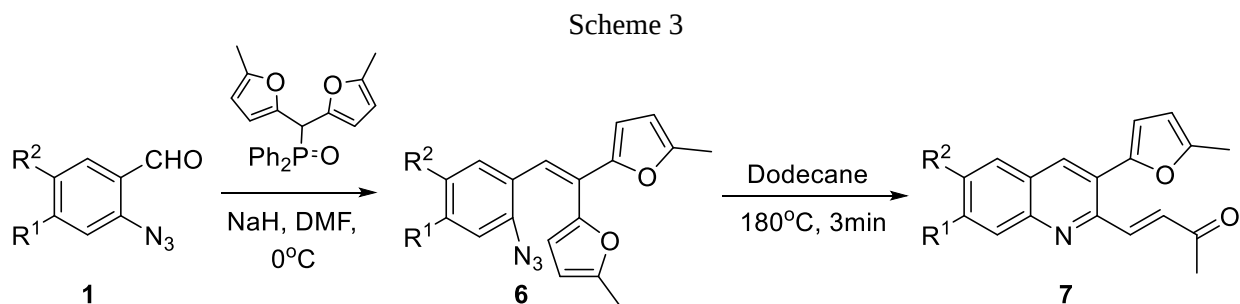
Ранее нами был предложен эффективный одностадийный метод синтеза фосфониевых солей из (гет)арилметилкарбинолов, что в частности позволило получать фурфурилфосфониевые соли **2**.^[1] Олефинирование по Виттигу замещенных 2-азидобензальдегидов **1** фурфурилфосфониевыми солями приводит к образованию смеси *цис*- и *транс*- изомеров соответствующих олефинов **3** (Схема 1).



Продуктами последующего термоллиза смеси *цис*- и *транс*-изомеров олефинов **3** являются два гетероциклических соединения. Интересно, что термоллиз *цис*-изомера приводит к образованию хинолина **4**, что связано с атакой нитрена по фурановому циклу и окислительным раскрытием последнего. Напротив, в случае *транс*-изомера протекает реакция Сандберга с образованием соответствующего индола **5** (Схема 2).



Более того, возможен синтез геминальных дифурилолефинов **6** посредством олефинирования 2-азидобензальдегидов **1** по Хорнеру-Виттигу с использованием соответствующего дифурилфосфиноксида. Термоллиз олефина **6** приводит к селективному образованию 2-ацилвинилхинолина (Схема 3)^[2].



Литература

1. Petrakis N. Chalikidi, Taimuraz T. Magkoev *et al.*; *J. Org. Chem.* **2021** 86, 9836-9846.
2. Taimuraz T. Magkoev, Petrakis N. Chalikidi *et al.*; *J. Org. Chem.* **2024** 89, 5778-5782.

СИНТЕЗ ХИНОКСАЛИНОВ, БЕНЗИМИДАЗОЛОВ И БЕНЗОКСАЗОЛВ С ПОМОЩЬЮ α -АЛКИЛ- α -НИТРОКЕТОНОВ В КАЧЕСТВЕ 1,2 И 1,1-БИСЭЛЕКТРОФИЛЬНЫХ РЕАГЕНТОВ

Аксенов А.В., Гришин И.Ю., Малюга В.В., Аксенов Д.А., Джигоева Р.Г., Аксенов Н.А.

Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь

vladimircrusader@gmail.com

В данной работе исследованы особенности реакционной способности α -алкил- α -нитроацетофенонов с 1,2-фенилендиаминами и *орто*-аминофенолами в кислой среде. Показана диверсификация пути протекания реакции в зависимости от применяемого катализатора, что открывает доступ к соответствующим бензоксазолам, бензимидазолам и хиноксалинам через азо-вариант реакции Нефа.

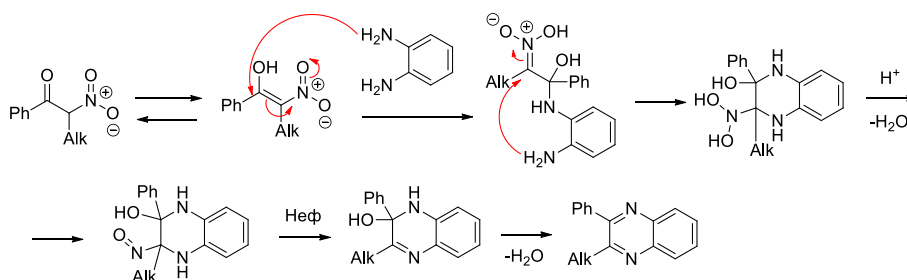


Схема 1. Предполагаемый механизм образования хиноксалинов.

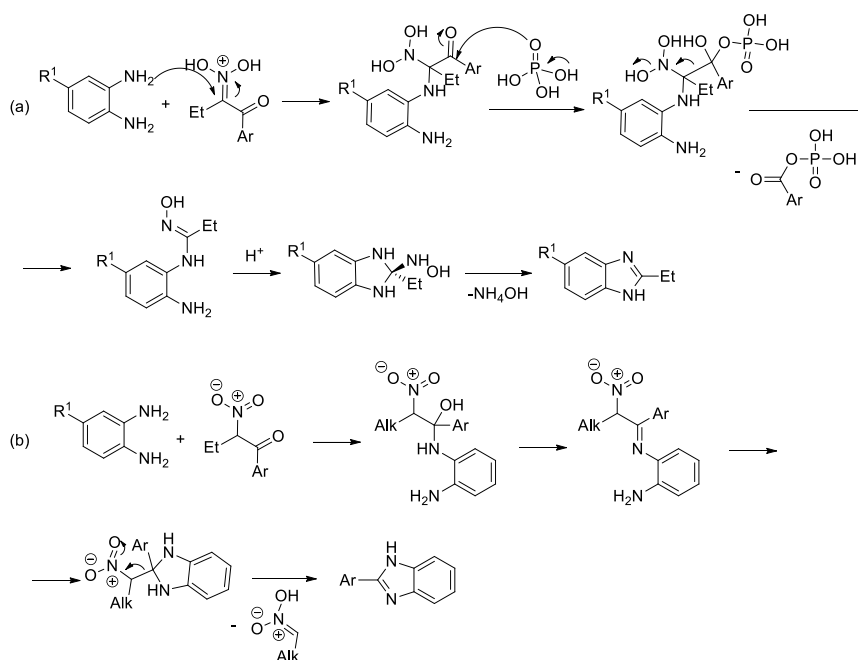


Схема 2. Предполагаемый механизм образования бензимидазолов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-00070

(3-(2-НИТРОФЕНИЛ)ОКСИРАН-2-ИЛ)(АРИЛ)МЕТАНОНЫ В СИНТЕЗЕ 2-АРИЛХИНОЛИНОВ И 6-ХЛОР-3-ГИДРОКСИ-2-АРИЛХИНОЛИН-4-ОНОВ

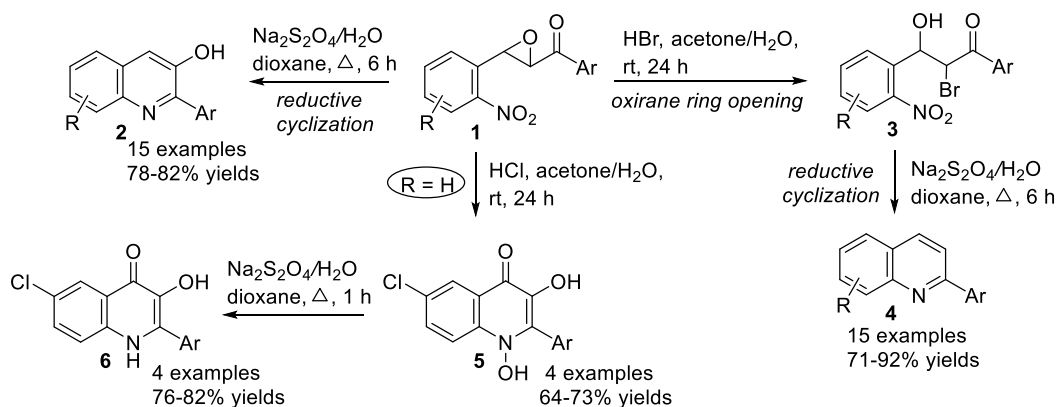
Мамедова С.В.^a, Мамедова В.Л.^b, Коршин Д.Э.^b, Кобелева Е.С.^b, Сякаев В.В.^b,
Губайдуллин А.Т.^b, Гаврилова Е.Л.^a, Синяшин О.Г.^b, Мамедов В.А.^{a, b}

^aКазанский национальный исследовательский технологический университет, кафедра органической химии, Казань, Россия;

^bИнститут органической и физической химии имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, лаборатория химии гетероциклических соединений, Казань, Россия.

e-mail: sevil-o@mail.ru

(3-(2-Нитрофенил)оксиран-2-ил)(арил)метаноны (**1**) можно рассматривать как *орто*-функционализированные нитроарены, имеющие высокий потенциал в построении гетероциклических систем [1]. В процессе восстановительной циклизации соединений **1** получены 3-гидрокси-2-арилхинолины (**2**) [2]. Восстановительная циклизация продуктов раскрытия оксиранового кольца бромистоводородной кислотой, а именно соединений **3**, привела к незамещённым в третье положение 2-арилхинолинам **4**. При действии соляной кислоты на соединения **1**, не имеющие дополнительных заместителей в структурообразующем бензольном кольце (R = H), были получены 6-хлор-N,3-дигидрокси-2-арилхинолин-4-оны (**5**), которые в средах с водным дитионитом натрия переходили в незамещённые по азоту хинолин-4-оны **6**.



С учётом высокой востребованности хинолиновых и хинолин-4-оновых производных различными сферами человеческой деятельности, включая медицину [3, 4], предложенные простые способы синтеза некоторых их представителей могут найти широкое практическое применение.

Литература

1. В.Л. Мамедова, С.В. Мамедова, Д.Э. Коршин, Е.Л. Гаврилова, В.А. Мамедов *Успехи химии*, 2025, **94**, RCR5167.
2. V.A. Mamedov, V.L. Mamedova, V.V. Syakaev, D.E. Korshin, G.Z. Khikmatova, E.V. Mironova, O.B. Bazanova, I.Kh. Rizvanov, Sh.K. Latypov *Tetrahedron*, 2017, **73**, 5082.
3. R.D. Taylor, M. MacCoss, A.D.G. Lawson, *J. Med. Chem.*, 2014, **57**, 5845.
4. S. Mahayo, A. Mukherjee, S. Santra, G.V. Zyryanov, A. Majee *Org. Biomol. Chem.*, 2019, **17**, 7907.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РНФ (грант 24-13-00098).
Физико-химические исследования проведены в ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН.

РАДИОФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЕ КОНЬЮГАТЫ ЛИГАНДОВ ПСМА: СИНТЕЗ, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

**Мачулкин А.Э.^а, Успенская А.А.^а, Петров С.А.^а, Бутакова Н.С.^а, Фуркина Е.Б.^б,
Зык Н.Ю.^а, Лунёва К.А.^с, Лунёв А.С.^с, Ларенков А.А.^в, Белоглазкина Е.К.^а, Мажуга А.Г.^г**

^аМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.

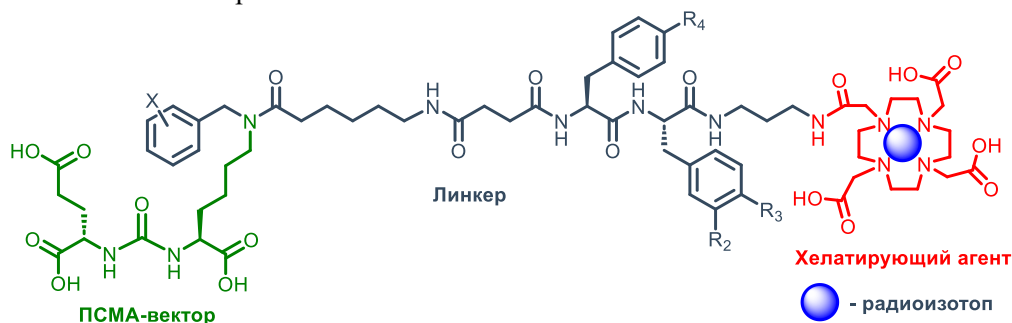
^бНациональный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия.

^сФГБУ ГНЦ ФМБЦ имени А.И. Бурназяна ФМБА России, Москва, Россия.

^гРХТУ им. Д.И. Менделеева., Москва, Россия.

e-mail: alekseymachulkin@rambler.ru

Рак предстательной железы – одна из самых распространенных онкологических патологий среди мужского населения, по данным мировой статистики за 2021 год. Одним из подходов разработки современной терапии или диагностики данного заболевания может выступать адресная доставка, направленная на простатический специфический мембранный антиген (ПСМА). В связи с этим актуальной задачей является дизайн новых высокоаффинных лигандов ПСМА и создание на их основе терапевтических конъюгатов на их основе. В последнее время, одним из наиболее динамически развивающихся направлений в области разработки противоопухолевой терапии является разработка радиофармацевтических лекарственных средств направленного, ввиду их высокой эффективности при относительно малом количестве побочных эффектов, по сравнению с классической химиотерапией.



В докладе будут подробно рассмотрены подходы к дизайну и синтезу лигандов ПСМА, а также конъюгатов, содержащих фрагменты хелатирующих агентов, позволяющих осуществлять направленную доставку диагностических/терапевтических радиоизотопов, таких как ^{68}Ga , ^{64}Cu , ^{177}Lu и ^{161}Tb .

Полученные экспериментальные данные показали, что введение диагностических конъюгатов приводит к эффективному их накоплению в опухолевой ткани. А в случае терапевтических конъюгатов, наблюдается заметное торможение роста опухоли, достигая максимума около 80% в период с 15 по 25 день после инокуляции суспензии клеток (с 4 по 14 день после введения РФЛП). Результаты исследований торможения роста ксенографта опухоли *in vivo* радиоconъюгатов с лютецием-177 показали значительное влияние на динамику роста опухолей. В докладе результаты физико-химических и биологических (*in vitro* и *in vivo*) испытаний данных конъюгатов будут рассмотрены более подробно.

Литература

1. A.E. Machulkin, S.A. Petrov, V. Bodenko, et.al. ACS Pharmacology and Translational Science, 2024, 7, 1457.
2. E.B. Furkina, A.A. Uspenskaia, S.A. Petrov et. al. Russian Chemical Bulletin, 2025, 74, 1285.
3. S.A. Petrov, G.P. Grigoriev, G.A. Orlov et.al. Bioconjugate Chemistry, 2025, 36, 748.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-15-00098-П, <https://rscf.ru/project/22-15-00098/>

ПУТИ КОНСТРУИРОВАНИЯ НОВЫХ ГИБРИДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ РЕАКЦИИ ПИРРОЛО[3,2,1-*ij*]ХИНОЛИН-1,2-ДИОНОВ И ТИОСЕМИКАРБАЗИДА

Медведева С.М., Скопцова А.А., Новичихина Н.П., Шихалиев Х.С.

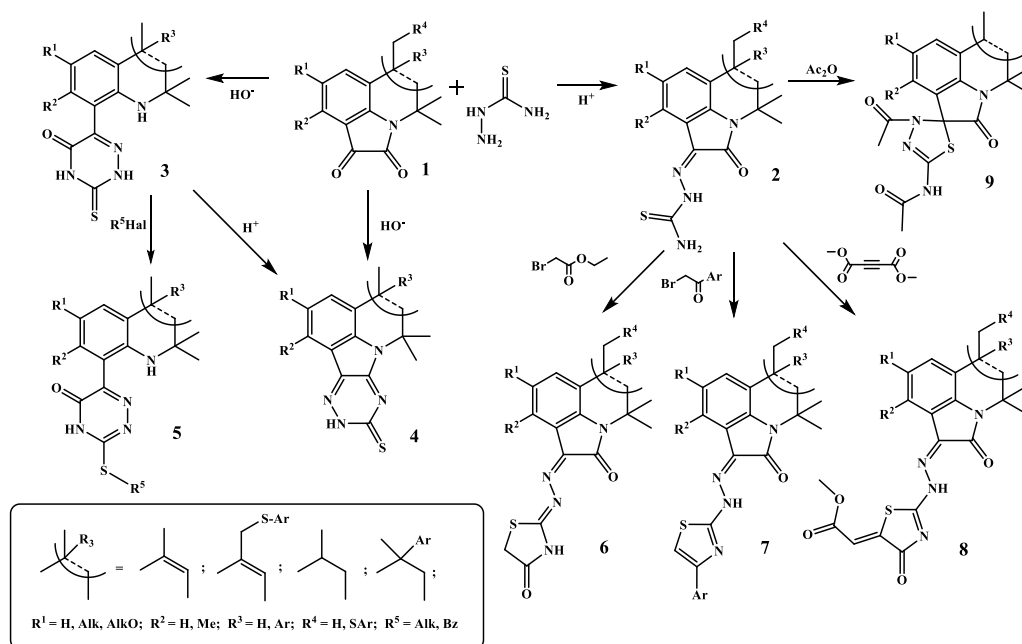
Воронежский государственный университет,
химический факультет, Воронеж, Россия.
e-mail: SMMedvedeva@rambler.ru

В настоящем докладе рассматриваются реакции замещенных гидрированных пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,2-дионов **1** с тиосемикарбазидом в различных условиях, дальнейшие превращения синтезированных продуктов, с целью получения гибридных конденсированных, линейно и спиросвязанных молекул, содержащих в своей структуре несколько фармакофорных гетероциклических фрагментов.

Установлено, что взаимодействие пирролохинолиндионов **1** с тиосемикарбазидом в кислой среде приводит к соответствующим тиосемикарбазонам **2**, в щелочной среде – к 6-(гидрохинолин-8-ил)-1,2,4-триазинам **3** или 1,2,4-триазино[6',5':4,5]пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-9-тионам **4**, которые также получены встречным синтезом из соединений **3**, алкилирование последних протекает по атому серы с образованием производных **5**.

Гибридные молекулы **6-8**, содержащие фрагмент пирролохинолина и тиазола, связанные через гидразиновый линкер, были получены при взаимодействии тиосемикарбазонов пирролохинолиндионов **2** с α -галогенкарбонильными соединениями или диметилowym эфиром ацетилендикарбоновой кислоты, соответственно.

Проведена внутримолекулярная спироциклизация тиосемикарбазонов **2** в среде уксусного ангидрида, сопровождающаяся ацилированием двух аминогрупп, приводящая к замещенным спиро[пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,3'-[1,2,4]диазотиолидин]-2-онам **9**. С помощью ВЭЖХ-МС установлен вероятный маршрут этого превращения.



Первичный скрининг ингибирующей активности *in vitro* показал, что среди соединений **6-8** есть ингибиторы с высокой дуальной активностью по отношению к факторам свертываемости крови Ха и XIa и тромбину.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2023-2025 годы, проект № FZGU-2023-0009.

СИНТЕЗ ОЛИГОАРИЛЕНЭТИНИЛЕНОВ НА ОСНОВЕ 4,5-ДИЭТИНИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛОВ

Менчиков В.В., Говди А.И.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: st106275@student.spbu.ru

Олигоариленэтинилены — это соединения, в которых тройные связи чередуются с ароматическими или гетероароматическими циклами, образуя длинную систему сопряжения (рис. 1). Такие соединения обладают усиленной флуоресценцией и могут применяться для флуоресцентной биовизуализации, изготовления светодиодов, сенсоров на биологически активные молекулы, нитросоединения или катионы металлов.

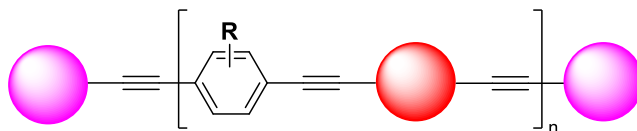
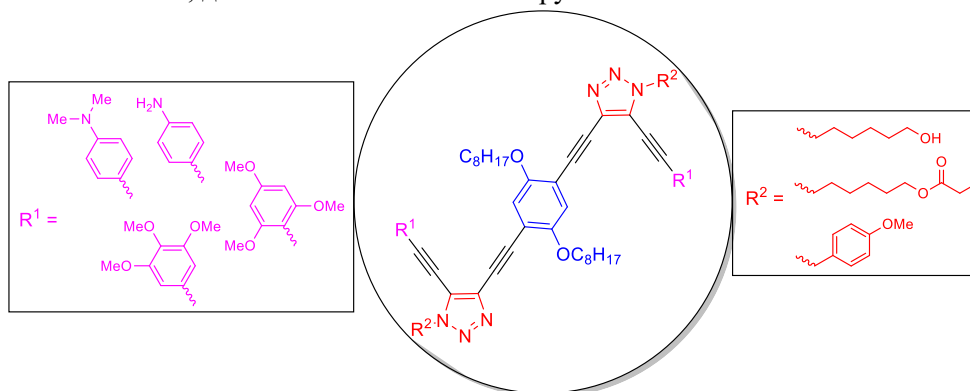


Рисунок 1. Общая формула олигоариленэтиниленов

Чаще всего такие олигомеры содержат замещенные бензольные кольца в основной цепи сопряжения. Однако в качестве мономеров могут выступать и гетероциклические производные. При этом в литературе отсутствуют данные об олигоариленэтиниленах, содержащих в основной цепи сопряжения 1,2,3-триазольный цикл. Поэтому цель данной работы – синтез олигоариленэтиниленов на основе 4,5-диэтинил-1,2,3-триазолов и изучения их фотофизических и сенсорных свойств.

В качестве целевых были выбраны структуры, содержащие донорные группы в 5 положении триазольного кольца (рис. 2), такие как amino-, диметиламино- и метоксигруппы.



Для полученных соединений были измерены спектры поглощения и флуоресценции в различных растворителях. В спектрах поглощения наблюдаются интенсивные полосы поглощения на 300 и 350 нм, с коэффициентами экстинкции 5.5×10^4 и 5×10^4 л/моль×см соответственно, максимумы эмиссии лежат в диапазоне 450-550 нм. Длина волны испускания увеличивается с увеличением полярности растворителя. Также были измерены квантовые выходы флуоресценции в растворах и в твердой фазе.

Литература

1. T. Pasinszki, B. Hajgato, B. Havasid, N. P. C. Westwood *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2009, **11**, 5263.
2. C. Grundmann, H. Frommeld, K. Flory, S. K. Datta *J. Org. Chem.*, 1967, **33**, 1464.
3. L. Lv, X. Zhou, H. Shi, J. Gao, W. Hu *J. Chem. Res.*, 2014, **38**, 368.
4. G. Molteni, A. Ponti, M. Orlandi *New J. Chem.*, 2002, 1340.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 075-15-2024-553). Исследования проведены с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ: «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества» и «Оптические и лазерные методы исследования вещества».

СИНТЕЗ АЗАГЕТЕРОЦИКЛОВ ПО РЕАКЦИИ ФОРМАЛЬНОГО [n+1]-ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ ДИАРИЛИОДОНИЕВЫХ СОЛЕЙ И ИЗОНИТРИЛОВ

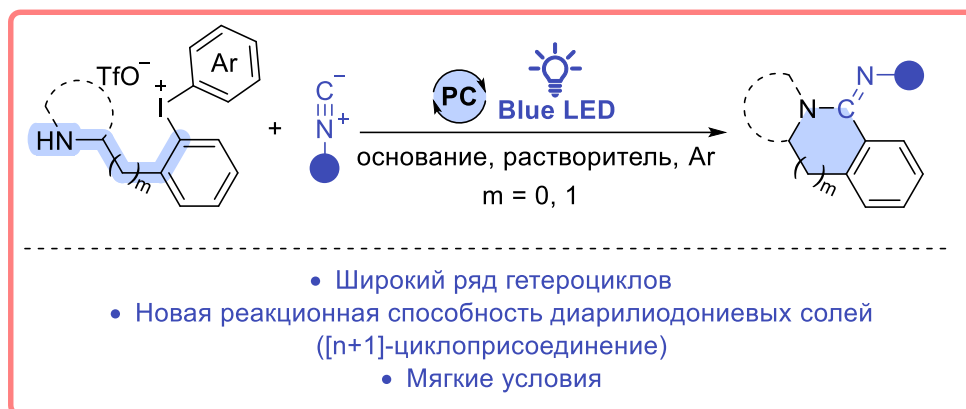
Метальникова Н.М., Антонкин Н.С., Юсубов М.С., Постников П.С.

Национальный исследовательский Томский Политехнический Университет,
Томск, Россия
e-mail: nmm@tpu.ru

Диарилиодониевые соли зарекомендовали себя как арилирующие агенты для широкого ряда нуклеофилов [1]. В частности, их успешно применяют для арирования гетероциклов с получением биологически активных соединений [2]. Более того, они применяются и непосредственно в сборке гетероциклических соединений. В подобных превращениях диарилиодониевые соли в основном выступают в роли C1-синтона или C2-синтона [3]. Известно лишь два примера [4+2]-циклоприсоединения, в которых иодониевые соли выступают в роли четырехчленных синтонов [4-5].

Сравнительно недавно в нашей научной группе были получены N-координированные иодониевые соли, реакционная способность которых остаётся практически неизученной [6]. Однако данные соединения имеют потенциал применения в реакции формального циклоприсоединения с одновременным образованием связей C-C и C-N.

В данном исследовании нами разработана реакция формальную [4+1]-циклоприсоединения изонитрилов к N-координированным иодониевым солям и в условиях фоторедокс-катализа с получением ценных гетероциклических соединений. Также открыта возможность применения иодониевых солей как пятичленных синтонов в аналогичном [5+1]-циклоприсоединении и использовании солей с O-координацией.



Литература

1. M. Fañanás-Mastral *Synthesis*, 2017, **49**, 1905.
2. T. Besson, C. Fruit *Pharmaceuticals*, 2021, **14**, 661.
3. C. Pan, L. Wang, J. Han, *TCR*. 2023. **10**, e202300138
4. W. Wang, J. Zhou, C. Wang, C. Zhang, X. Q. Zhang, Y. Wang, *Commun. Chem.*, 2022, **5**, 145.
5. J. Li, H. Wang, J. Sun, Y. Yang, L. Liu, *Org. Biomol. Chem.*, 2014, **12**, 7904.
6. Y. A. Vlasenko, T. J. Kuczmera, N. S. Antonkin, R. R. Valiev, P. S. Postnikov, B. J. Nachtsheim, *Adv. Synth. Catal.*, 2022, **365**, 535.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 21-73-20031-П).

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ НА ОСНОВЕ ФТАЛАЗОЛА В КАЧЕСТВЕ СЕЛЕКТИВНЫХ ИНГИБИТОРОВ PARP1: ИССЛЕДОВАНИЯ *IN VITRO* И *IN SILICO*

Миколайчук О.В., Шемчук О.С., Петухова Н.В., Молчанов О.Е., Майстренко Д.Н.

ФГБУ «Российский научный центр радиологии и хирургических технологий имени академика А. М. Гранова»
Министерства здравоохранения РФ, Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: olgamedchem@gmail.com

Рак яичников представляет собой гетерогенное заболевание, тяжело поддающееся лечению. В связи с высокой распространенностью дефицита гомологичной рекомбинации при раке яичников, появление ингибиторов поли (АДФ-рибоза) полимеразы (PARP) позволило существенно улучшить результаты лечения [1]. Ингибиторы PARP блокируют работу ферментов, в первую очередь PARP1, необходимых для восстановления одноцепочечных разрывов ДНК. Внедрение ингибиторов PARP способствовало увеличению 5-летней выживаемости при раке яичников с 36% в 1975 году до 51% в 2019 году [2]. Однако современные ингибиторы PARP, как правило, неспецифичны, что обуславливает необходимость в разработке более разнообразной библиотеке селективных ингибиторов PARP1.

В данной работе из исходного 4-бензоилфалазин-1(2H)-она (3) были получены 12 новых соединений, потенциальных ингибиторов PARP1. Исходная 4-оксо-3,4-дигидро-фалазин-1-карбоновая кислота (1) была получена путем реакции окисления нафталина перманганатом калия по ранее описанным методикам [3].

Цитотоксичность синтезированных соединений была протестирована с помощью МТТ теста, а также индукции апоптоза посредством ингибирования PARP. Некоторые соединения продемонстрировали сильную цитотоксическую активность со значениями IC_{50} 0,91; 1,88 и 0,67 μ M на клеточной линии MDA-MB-436, что сопоставимо с фалазопарибом (IC_{50} = 0,13 μ M) [4]. Ингибирующий потенциал новых гибридных соединений в отношении PARP-1 сравнивали с сокристаллом целевого рецептора (PDB ID: 6NTU) с использованием Docking моделирования. Полученные результаты согласуются с исследованиями *in vitro*, которые выявили высокое сродство полученных соединений к PARP1 (Рисунок 1). Следовательно, производные фалазола могут рассматриваться как потенциальные селективные ингибиторы PARP в терапии рака яичников.

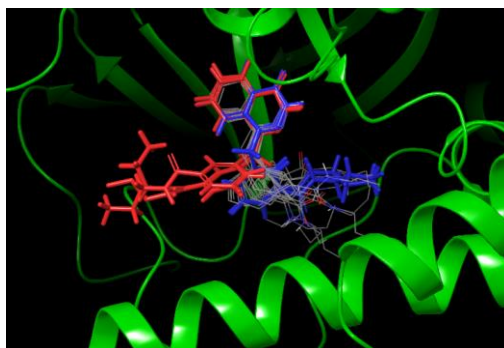


Рисунок 1 – Моделирование взаимодействия этил 2-(5-(4-(4-оксо-3,4-дигидрофалазин-1-карбонил)фенил)-2H-тетразол-2-ил)ацетата (8) с PARP1

Литература

- А.А. Румянцев *Фарматека*, 2018, **12**, 7-13.
W.P. Tew, C. Lacchetti, A. Ellis, K. Maxian, S. Banerjee, M. Bookman, M.B. Jones, J.M. Lee, S. Lheureux, J.F. Liu, K.N. Moore, C. Muller, P. Rodriguez, C. Walsh, S.N Westin, E.C. Kohn *J Clin Oncol.*, 2020, **13**, 3468–3493.
J. Sangshetti, K.S. Pathan, R. Patil, S.A. Ansari, S. Chhajed, R. Arote, D.B. Shinde, *Bioorg. Med. Chem.*, 2019, **27**, 3979-3997.
M.Y. Keung, Y. Wu, F. Badar, J.V. Vadgama, J.V. *Journal of clinical medicine*, 2020, **9**, 940-947.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минздрава России (Государственное задание №1024022100070-3).

NBS-ИНИЦИИРУЕМАЯ РЕАКЦИЯ СУЖЕНИЯ ПИРИМИДИНОВОГО ЦИКЛА КАК НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ИМИДАЗО[2,1-В]ТИАЗОЛОВ

Мингажетдинова Д.О.^{а,б}, Агарков А.С.^{а,б}, Литвинов И.А.^а,
Соловьева С.Е.^а, Антипин И.С.^а

^аИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия.

^бКазанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия.
e-mail: doming01@mail.ru

Стратегия модификации гетероциклических каркасов в сложных молекулах представляет собой передовую область синтетической химии, имеющую огромное значение для создания лекарственных препаратов [1]. В отличие от модификации периферийных функциональных групп без изменения основного скелета молекулы ремоделинг («Remodelling molecular framework») благодаря высокоселективным реакциям позволяет на поздних стадиях избирательно проводить замену гетероциклической платформы с высокими выходами [2-4].

В данной работе было продемонстрировано превращение 2-арилметиленовых производных тиазоло[3,2-*a*]пириимидина в присутствии N-бромсукцинимид, генерирующего *in situ* молекулярный бром, и воды в производные имидазо[2,1-*b*]тиазола за счет сопряженного электрофильного присоединения (Рисунок 1б). Данная реакция сопровождается появлением нового асимметрического атома углерода и как следствие переходом из планарного 2D-пириимидина в 3D-дигидроимидазол, что в дальнейшем может быть использовано для хирального распознавания. Показано, что данная перегруппировка протекает в мягких условиях и с высокими выходами (Рисунок 1а,в).

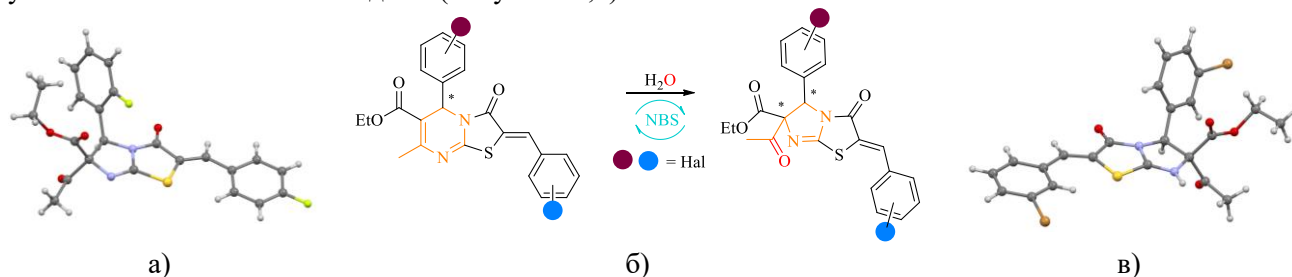


Рисунок 1. а), в) Геометрия производных имидазо[2,1-*b*]тиазола в кристалле; б) схема реакции сужения тиазоло[3,2-*a*]пириимидина в системе NBS-вода

Литература

1. X. Tao, H. Han, J. Jeong, D. Kim, S. Hong *J. Am. Chem. Soc.*, 2025, **147**, 21143.
2. R. Sharma, M. Arisawa, S. Takizawa, M. S. H. Salem *Org. Chem. Front.*, 2025, **12**, 1633.
3. T. Yuan, L. Shi *Org. Chem. Front.*, 2024, **11**, 7318.
4. E.-Q. Li, C. W. Lindsley, J. Chang, B. Yu *J. Med. Chem.*, 2024, **67**, 13509.

ИССЛЕДОВАНИЕ [4+2] ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ ДИПОЛЕЙ К 1Н-ПИРРОЛ-2,3-ДИОНАМ ДЛЯ ПОИСКА НОВЫХ ФУНГИЦИДОВ

Мороз А.А., Дмитриев М.В., Масливец А.Н.

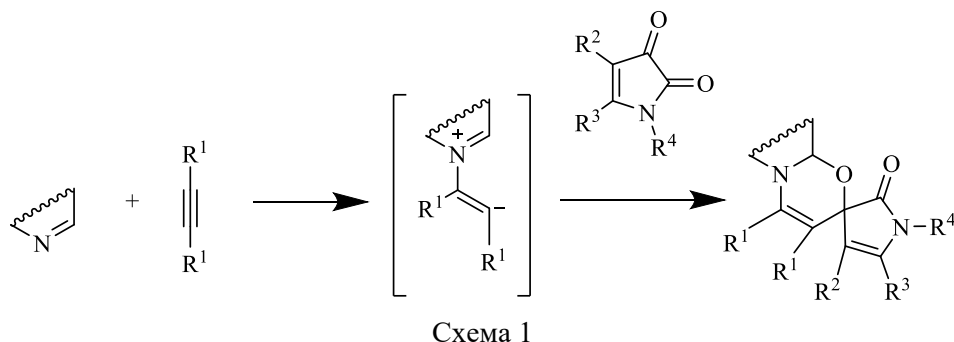
Пермский государственный национальный исследовательский университет,
химический факультет, Пермь, Россия.
e-mail: anna.moroz@mail.ru

1Н-Пиррол-2,3-дионы обладают возможностью вступать в реакции циклоприсоединения с диполями как по экзо-циклическим С=О двойным связям, так и по эндо-циклической $C^4=C^5$ связи, что обеспечивает возможность синтеза спиро- и аннелированных по стороне гетероциклических систем, часто обладающих биологической активностью.

Дефицит противогрибковых препаратов и постоянное появление устойчивых вариантов грибов требуют разработки новых фунгицидов. Использование пирролдионов в реакциях диполярного циклоприсоединения позволяет получать в одну стадию замещенные спирооксазины, производные которых продемонстрировали потенциал в качестве фунгицидов [1].

1,4-диполи, полученные из DMAD или других активированных ацетиленов и азагетероциклов, взаимодействуют с различными карбонильными соединениями, например, изатинами, 4-хинонами, альдегидами и т. д. [2-5].

Нами предложено исследование взаимодействия пирролдионов с 1,4 диполями, полученными из активированных ацетиленов и азотсодержащих гетероциклов, таких как пиридин [6], N-бензилбензимидазол, изохинолин (схема 1).

**Литература**

1. Xu Y., Shen Y., Du C., Liu L., Wu H., Ji Q. *Eur. J. Med. Chem.*, 2022, **243**, 114723.
2. Nair V., Devipriya S., Suresh E. *Tetrahedron*, 2008, **64**, 3567.
3. Nair V., Sreekanth A. R., Abhilash N., Biju A. T., Devi B. R., Menon R. S., Srinivas R. *Synthesis*, 2003, **12**, 1895.
4. Xu Z., Sun T., Cai Q., Ni F., Han J., Chen J., Cao W. *J. Fluor. Chem.*, 2016, 181, 45.
5. Sun T., Cai Q., Li M., Wang Z., Chen J., Deng H., Cao W. *Tetrahedron*, 2015, **71**, 6224.
6. Galeev A. R., Moroz A. A., Dmitriev M. V., Maslivets A. N. *RSC advances*, 2022, **12**(1), 578.

Работа выполнена при поддержке министерства науки и высшего образования (проект FSNF-2025-0013)

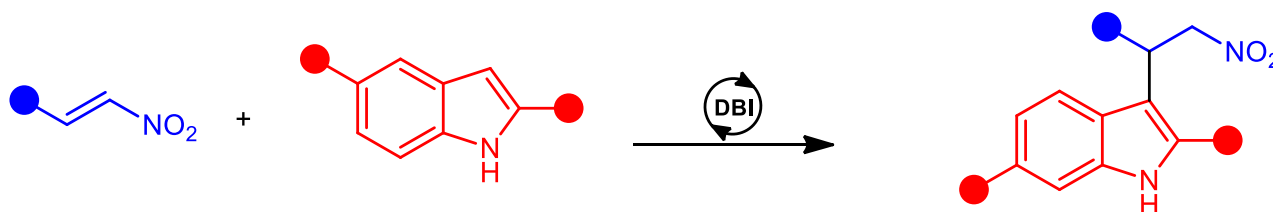
ИОДОЛИЕВЫЕ СОЛИ КАК КАТАЛИЗАТОРЫ ТВЕРДОФАЗНОГО
СИНТЕЗА ПРОИЗВОДНЫХ ИНДОЛАМячина К.А., Солдатова Н.С.

Томский политехнический университет,
Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий, Томск, Россия.
e-mail: kam39@tpu.ru

Современная органическая химия стремится к минимизации воздействия на окружающую среду, что в последние десятилетия привело к активному развитию идей зелёной химии. Одним из ключевых направлений данной концепции является отказ от токсичных органических растворителей и переход на методы твердофазного синтеза. Особенно актуален данный подход в области разработки лекарственных препаратов, где крайне важно сократить использование опасных реагентов и упростить процесс очистки целевых соединений [1].

В числе фармакофорных фрагментов индол занимает особое положение, что делает разработку экологичных методов его функционализации крайне востребованной задачей [2]. Традиционные методы синтеза производных индола, включая реакцию Михаэля, часто включают использование токсичных катализаторов (например, комплексы переходных металлов) [3-4] или использование органических растворителей [5], что побуждает нас искать новые подходы для их получения.

В нашем исследовании был разработан новый метод присоединения по Михаэлю в мягких условиях. В качестве катализатора в данной работе предложены циклические иодониевые соли, как доступные и эффективные реагенты. Ключевой особенностью данного метода является проведение реакции в отсутствие растворителя, что соответствует концепции зелёного синтеза и минимизирует образование вредных отходов.

**Литература**

1. N. Cankařová, E. Schütznerová, V. Krchnak *Chem. Rev.*, 2019, **119**, 12089-12207.
2. C. M. Marshall, J. G. Federice, C. N. Bell, J. T. Njardarson *J. Med. Chem.*, 2024, **67**, 11622-11655.
3. T. Kitanosono, T. Hisada, Y. Yamashita, S. Kobayashi *Angew. Chem.*, 2021, **133**, 3449-3453.
4. Z. P. Zhan, R. F. Yang, K. Lang *Tetrahedron Lett.*, 2005, **46**, 3859-3862.
5. L. T. An, J. P. Zou, L. L. Zhang, Y. Zhang *Tetrahedron Lett.*, 2007, **48**, 4297-4300.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 23-73-10091).

ПОЛУЧЕНИЕ БИЦИКЛИЧЕСКИХ АЗИРИДИНОВ И ИХ РАСКРЫТИЕ АЛИФАТИЧЕСКИМИ АМИНАМИ

Непочатый Г.Д.^а, Ким К.А.^а, Степаков А.В.^{а,б}^аСанкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), кафедра органической химии^бСанкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
e-mail: nepochatyy99@yandex.ru

Азиридины представляют собой ценные строительные блоки в органической и медицинской химии благодаря высокому напряжению трехчленного цикла и широкому спектру биологической активности. Многие соединения, содержащие азиридиновый фрагмент, проявляют антибактериальные, противоопухолевые и противовирусные свойства, что делает их перспективными объектами для разработки новых фармакологически ценных веществ [1].

В рамках данного исследования нами был синтезирован ряд бициклических азиридинов общей формулы **3**, и проведено раскрытие сукцинимидного цикла в данных бициклических системах с помощью различных первичных аминов. Этот подход позволил нам разработать простой и эффективный метод синтеза широкого круга ранее неизвестных 1-арилазиридин-2,3-дикарбоксамидов **4** (Рисунок 1). Такие соединения обладают широкими возможностями для дальнейшей функционализации и представляют интерес с точки зрения изучения биологической активности.

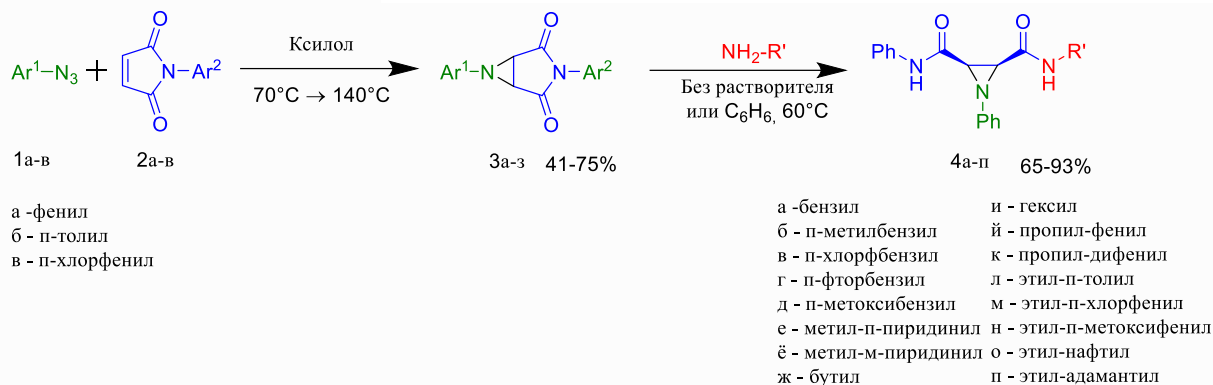


Рисунок 1 – Схема синтеза полученных соединений.

Литература

[1] Christian Dank, Laura Ielo: Recent advances in the accessibility, synthetic utility, and biological applications of aziridines, Org. Biomol. Chem., 2023

НАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ НА ОСНОВЕ 2-ЗАМЕЩЕННЫХ ТИАЗОЛО[3,2-*a*]ПИРИМИДИНОВ: МЕТАНОЛИЗ-ИНДУЦИРОВАННАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА, ДИСПИРОЦИКЛИЗАЦИЯ И СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПРОДУКТОВ РЕАКЦИИ

Нефедова А.А.^а, Агарков А.С.^а, Мингажетдинова Д.О.^а, Французова Л.В.^а,
Литвинов И.А.^а, Соловьева С.Е.^{а,б}, Антипин И.С.^{а,б}.

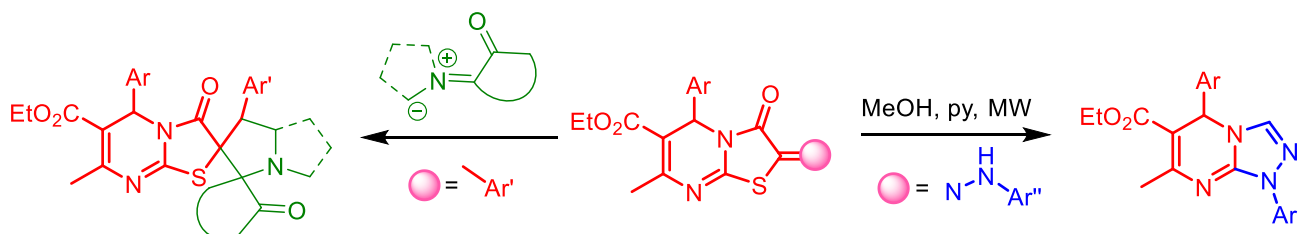
^аИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова,
ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

^бФедеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет",
420008, Россия, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18.
e-mail: nef.6@yandex.ru

Тиазоло[3,2-*a*]пиримидины, содержащие во втором положении заместитель с экзоциклической двойной связью, представляют значительный интерес в качестве перспективных строительных блоков для получения биологически активных соединений. Их высокая реакционная способность и структурное разнообразие открывают широкие возможности для направленного синтеза функционализированных производных.

В настоящем исследовании изучено [3+2]-циклоприсоединение, генерируемых *in situ* азометинилидов, образующихся из 1,2-дикетонов и N-замещенных аминокислот, как эффективный метод получения новых диспироточленённых структур на тиазопиримидиновой платформе [1,2].

Учитывая перспективность тиазоло[3,2-*a*]пиримидинов как строительных блоков, а также принимая во внимание способность тиазоло[3,2-*a*]пиримидинового остова претерпевать перегруппировки под воздействием микроволнового излучения и активирующее влияние гидразонной группы на скелетные перестройки [3,4], в настоящей работе было исследовано поведение арилгидразоновых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина в условиях микроволнового облучения в присутствии метанола и пиридина. Таким образом, данное исследование направлено на расширение возможностей модификации тиазоло[3,2-*a*]пиримидинов и получение новых производных с потенциально полезными свойствами.



Литература

1. A.N. Izmet'ev et al. *Chem. Heterocycl. Compd.* 2020, 56(3), 255–264.
2. A. Nefedova et al. *Chemistry Proceedings*, 2024, 16(1), 24.
3. A.S. Agarkov et al. *Dokl. Chem.* 2022, 505(2), 177–183
4. E.A. Lashmanova et al. *Chem. Heterocycl. Compd.* 2019, 55(12), 1217–1221.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 25-23-00404).

МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ БИС-ВОДИРЬ - ОКСО-ДИБОРНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ПОРФИРАЗИНОВ

Никитин И.А., Попков А.Д., Стужин П.А.

Ивановский Государственный Химико-Технологический Университет,
 НИИ химии Макрогетероциклических соединений,
 Иваново, Шереметевский проспект 7, 153000
 e-mail: ivan.nikitin-15@yandex.ru

Фталоцианины (Pc) — макрогетероциклические соединения, являющиеся синтетическими аналогами распространённых в природе порфиринов. Комплексы Pc известны для большинства металлов Периодической таблицы элементов Менделеева, а также для некоторых неметаллов, таких как кремний (IV) и фосфор (V). В отличие от всех других элементов, атом бора (III) из-за малого ионного радиуса и склонности к тетраэдрической координации не может образовывать связи со всеми четырьмя пиррольными атомами азота макроцикла. Ввиду этого для бора характерно образование диборных производных [1]. В их составе каждый из двух атомов бора, соединённых оксо-мостиком, образует связи с двумя соседними пиррольными атомами азота и лигандом в аксиальном положении (например, фтором или другими заместителями). Следует отметить, что два атома бора могут занимать как *цис*-, так и *транс*-положение по отношению к полости фталоцианина. Концептуально диборные производные можно считать бис-BODIPY, в которых сочетание двух молекул аза-дипиррометенов (aza-BODIPY) посредством атомов азота приводит к образованию макроцикла Pc с двумя атомами бора в центральной полости (Рис. 1).

О получении оксо-диборного тетра-*трет*-бутил фталоцианина с разными аксиальными заместителями сообщалось в статье научной группы Р. Brothers [2]; однако спектральные и фотофизические характеристики этих соединений до сих пор не были изучены. Целью настоящей работы было исследование спектральных свойств *цис*- и *транс*-оксо-диборных производных фталоцианинов в основном и возбужденном состояниях. Представлены результаты исследования спектрально-люминесцентных и фотофизических свойств *транс*-оксо-(дифторборного) производного тетра-*трет*-бутил фталоцианина [(tBu)₄PcO(FB)₂] [3], а также *цис*-оксо-(дифенилборного) производного [(tBu)₄PcO(FPh)₂]. В докладе также обсуждается влияние азамещения в бензольных кольцах фталоцианинового макроцикла и периферических заместителей на возможность получения новых оксо-диборных производных. Строение макроциклов было установлено на основании ИК-, ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии MALDI-TOF. Обсуждаются результаты данные теоретического исследования строения и спектральных свойств методом DFT.

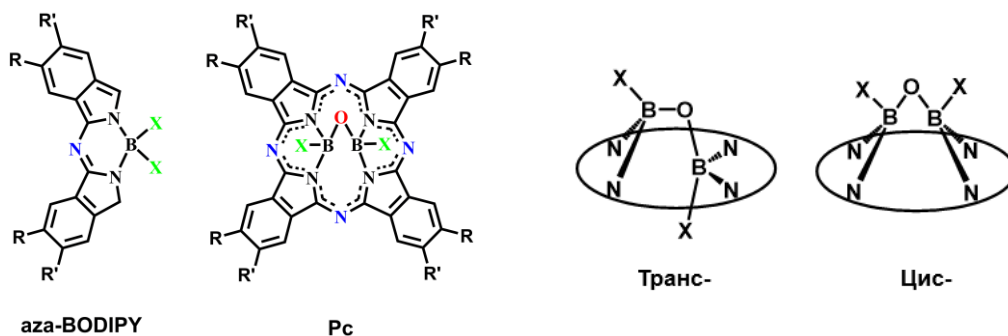


Рисунок 1. Структура аза-дипиррометенов (aza-BODIPY) и оксо-диборного производного фталоцианина (Pc); вид *транс*- и *цис*-положения атомов бора по отношению к полости фталоцианина

Литература

1. Brothers P.J. / J. Chem. Commun. – **2008**. – №. 18. – P. 2090 – 2102.
2. Tay A.C., P.J. Brothers et al. / J. Angewandte Chemie. – **2019**. – V. 131 – P. 3089 – 3093.
3. Nikitin I.A. Popkov A.D., Stuzhin P.A. / J. Coord. Chem. – **2024**. – V. 77. №. 11 – P. 1236 – 1255.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 25-73-20126.

СХОДСТВА И РАЗЛИЧИЯ В РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ 3-НИТРОБЕНЗОФУРАНОВ И 3-НИТРО-4Н-ХРОМЕНОВ

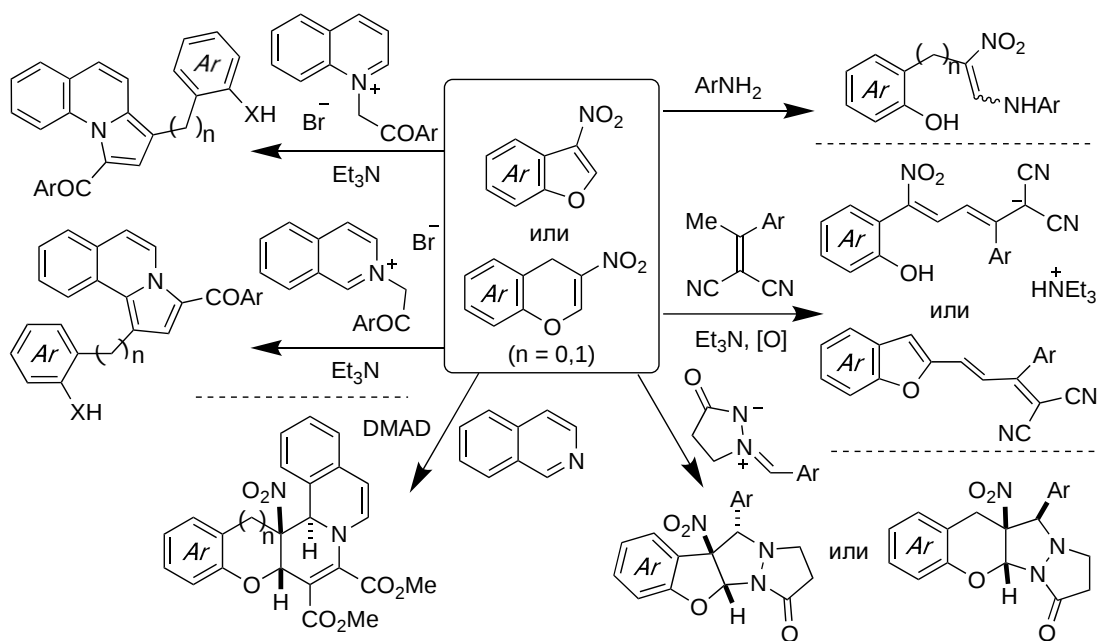
Осипов Д.В., Ращепкина Д.А., Осянин В.А.

Самарский государственный технический университет,
Самара, Россия.

e-mail: osipovdv25@mail.ru

Реакции карбо- и гетероциклических соединений, которые включают стадию деароматизации, повсеместно используются для получения функционализированных гетероциклов. В последние годы активно исследуются аддитивные реакции с участием высокополяризованных пятичленных гетероциклов, которые имеют в своей структуре акцепторный заместитель, находящийся в прямом сопряжении с гетероатомом либо через обычную двойную связь (акцептор в β -положении), либо через диеновую систему (акцептор в α -положении). В связи с высокой активностью двойной связи такие гетероциклы активно используются для введения в разнообразные реакции как сопряженного присоединения в качестве акцептора Михаэля, так и в реакции $[2+n]$ -аннелирования в качестве источника двухуглеродного фрагмента с получением широкого спектра функционализированных гетероциклов. Наше внимание привлекли 3-нитробензофураны и 3-нитрохромены, которые также можно рассматривать как циклические нитровиниловые эфиры

В докладе будут освещены аддитивные реакции пуш-пульных гетероциклов с различными нуклеофилами и диполями, протекающие как с раскрытием O-гетероциклического фрагмента, так и с его сохранением.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00253-П).

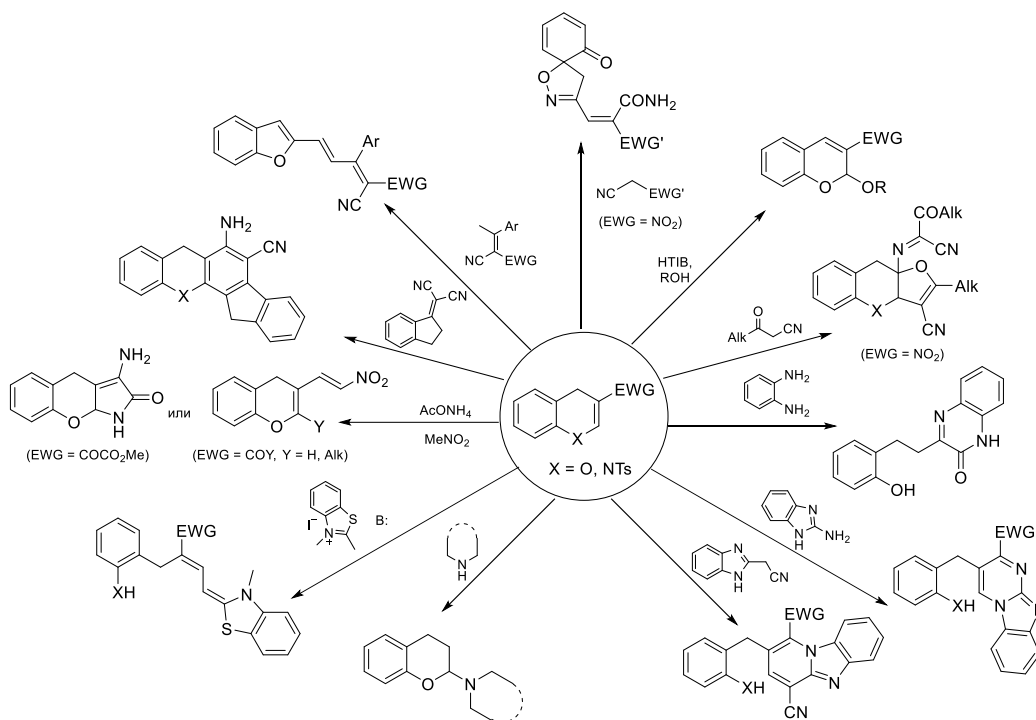
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ПУШ-ПУЛЬНЫХ 4H-ХРОМЕНОВ И ИХ АЗА-АНАЛОГОВ

Осянин В.А., Корженко К.С., Красников П.Е., Осипов Д.В.

Самарский государственный технический университет,
Самара, Россия.e-mail: vosyanin@mail.ru

В последние десятилетия функционализированные 4H-хромены, структурный фрагмент которых встречается в большом числе природных соединений, в первую очередь флавоноидов, стали привилегированной основой для разработки новых подходов к синтезу гетероциклических соединений, содержащих фармакофорные группы. В отличие от 2H-изомеров 4H-хромены, а также их аза-аналоги – 1,4-дигидрохинолины – в синтезе гетероциклических систем используются значительно реже, что связано с их меньшей стабильностью и синтетической доступностью. При этом в одних реакциях происходит сохранение пиранового или дигидропиридинового гетероцикла, в других – его раскрытие с образованием 2-гидрокси(амино)бензильных производных, а в третьих – трансформация в иные гетероциклические системы.

В докладе будут рассмотрены способы синтеза ареноконденсированных кислород- и азотсодержащих гетероциклов, включающих фрагмент бензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидина, бензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиридина, хиноксалин-2(1H)-она, бензо[5,6]хромено[2,3-*b*]пиррола, 7,13-дигидроиндено[1,2-*c*]ксантена и др. Будут обсуждаться реакции 3-нитро-4H-хроменов и их бензаналогов с метиленактивными нитрилами, которые в зависимости от природы растворителя, основания и его количества приводят либо к 3а,9а-дигидро-9H-фуру[3,2-*b*]хроменам, либо к раскрытию пиранового цикла и образованию метиновых солей. Последние в протонной среде способны подвергаться деароматизации с образованием спироциклических производных изоксазола.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00253-П).

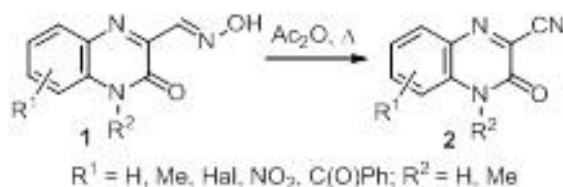
ПЕРЕГРУППИРОВКА МАМЕДОВА В СИНТЕЗЕ 2-(БЕНЗИМИДАЗОЛ-2-ИЛ)ПЕРИМИДИНОВ

**Перевалова Д.С., Бесчастнова Т.Н., Сякаев В.В.,
Губайдуллин А.Т., Жукова Н.А., Мамедов В.А.**

Институт органической и физической химии имени А. Е. Арбузова ФИЦ
«Казанский научный центр РАН», Москва, Россия.
e-mail: dashaperevalova20@gmail.com

Перимидины широко применяются в промышленной и медицинской химии [1, 2], что обуславливает интерес исследователей к разработке новых стратегий синтеза соединений этого класса. Основным подходом к синтезу 2-(гетеро)арилперимидинов является реакция 1,8-диаминонафталина (ДАН) с дорогостоящими (гетеро)арилкарбальдегидами, протекающая через образование дигидропроизводных перимидина.

Работа посвящена разработке нового метода получения 2-(бензимидазол-2-ил)перимидинов из ДАН и легко доступных хиноксалин-2(1*H*)-он-3-карбонитрилов. Хиноксалинон-3-карбонитрилы **2** были синтезированы кипячением соответствующих хиноксалинон-3-карбалдьдоксимов **1** в уксусном ангидриде.



Установлено, что хиноксалинон-3-карбонитрилы **2** под действием ДАН **3** в кипящей АсОН претерпевают перегруппировку Мамедова [3-6] с образованием 2-(бензимидазол-2-ил)перимидинов **4**. Процесс протекает по механизму типа ANRORC через 1,3-дигидро-1'*H*-спиро[перимидин-2,2'-хиноксалин]-3'(4'*H*)-оны **A**, генерируемые *in situ*.



Перегруппировка применима к аза-аналогам и би-производным хиноксалинон-3-карбонитрила.

Таким образом, предложен эффективный, простой в исполнении “one-pot” метод синтеза 2-(бензимидазол-2-ил)перимидинов. Преимуществами данного метода являются доступность исходных соединений, толерантность к различным функциональным группам.

Литература

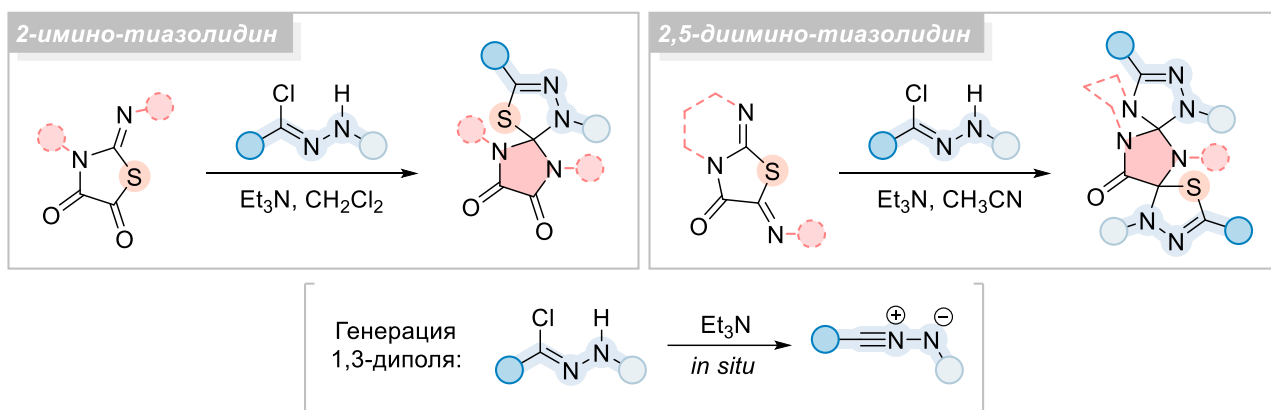
1. N. Sahiba, S. Agarwal *Top. Curr. Chem.* 2020, **378**, 1.
2. T. A. Farghaly, S. A. Al-Hussain, Z. A. Muhammad, M. A. Abdallah, M. E. A. Zaki *Curr. Org. Chem.*, 2020, **24**, 1669.
3. A. Hassner, I. Namboothiri *Organic syntheses based on name reactions*. 3th ed. Amsterdam: Elsevier, 2012, 299.
4. V. A. Mamedov *RSC Adv.*, 2016, **6**, 42132.
5. V. A. Mamedov *Quinoxalines. Synthesis, Reactions, Mechanisms and Structure*; Springer International: Switzerland, 2016, 437 p.
6. V. A. Mamedov, N. A. Zhukova *Synthesis*, 2021, **53**, 1849.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФ (грант 24-13-00098).
Физико-химические исследования проведены в ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН.

ДИПОЛЬ-ИНИЦИИРОВАННЫЕ ПЕРЕГРУППИРОВКИ
ИМИНО-ТИАЗОЛИДИНОВПетрова Ю.В.^{a,b}, Кукушкин М.Е.^a^aМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия; ^bРоссийский университет
дружбы народов имени Патриса Лумумбы (РУДН), Москва, Россия.e-mail: ulenkauiulenska@mail.ru

Реакции 1,3-дипольного циклоприсоединения, широко используемые в синтезе пятичленных гетероциклических соединений, часто рассматриваются как простой и эффективный подход к получению разнообразных органических веществ [1]. Благодаря большому массиву экспериментальных данных и развитию методов компьютерного моделирования эти реакции стали не только удобными для современного исследователя, но и во многом предсказуемыми с точки зрения регио-, стерео- и хемоселективности. Тем не менее, будучи в ряде случаев сопряженным, но не синхронным процессом, взаимодействие с диполями может сопровождаться побочными реакциями и внутримолекулярными перегруппировками, приводящими к продуктам, не соответствующим формальному [3+2]-циклоприсоединению [2]. В тех случаях, когда эти процессы становятся превалирующими, становится возможным получение новых типов соединений, синтез которых альтернативными способами может быть крайне затруднительным [3].

Целью данной работы стало исследование реакций нитрилиминов и производных тиазолидина, содержащих одну или две имино-группы, доступные для атаки диполя.



Обнаружено, что в каждом из этих случаев, присоединение одной или двух молекул диполя сопровождается «заменой» атома серы в исходном тиазолидине на экзоциклический атом азота. В результате образуются соединения, содержащие спиросочлененные имидазолидиновый и 1,2,4-тиадазолиновый фрагменты. Механизм превращений предложен на основании результатов DFT-расчетов.

Литература

1. M. Breugst, H.-U. Reissig *Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, **59**, 12293.
2. B. Liu, X.-F. Li, H.-C. Liu, X.-Y. Yu *Tetrahedron Lett.* 2013, **54**, 6952.
3. I. Yavari, Z. Taheri, M. Naeimabadi, S. Bahemmat, M. Halvagar *Synlett* 2018, **29**, 918.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00173).

СИНТЕЗ, ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУРА-СВОЙСТВА И СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ НОВЫХ АННЕЛИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНОГО СТРОЕНИЯ НА ОСНОВЕ ИНДОЛ[3,2-Ь]ИНДОЛА И БЕНЗОТИЕНО[3,2-Ь]БЕНЗОТИОФЕНА

**Полетавкина Л.А., Дядищев И.В., Бакиров А.В., Свидченко Е.А.,
Перегудова С.М., Лупоносов Ю.Н.**

Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Москва, Россия.

e-mail: l.poletavkina@ispm.ru

Органические полупроводниковые материалы активно разрабатываются и исследуются, что открывает широкие перспективы для развития современных научных и технологических направлений. Перед синтезом новых соединений крайне важно тщательно проектировать их структуру, поскольку именно она определяет не только проводящие и электрохимические свойства, но также фазовое поведение, растворимость и способность к определенным типам кристаллической упаковки, что в конечном итоге влияет на электрические характеристики и возможность создания функциональных устройств [1]. Особый интерес представляют структуры, сочетающие электронно-донорные (Д) и электронно-акцепторные (А) фрагменты (Д-А). Такие системы позволяют, варьируя силу и природу донорных и акцепторных компонентов, контролировать молекулярные энергетические уровни в широком диапазоне, достигая заданных свойств у целевых соединений [2]. Органические молекулы, построенные на основе конденсированных гетероароматических фрагментов, вызывают отдельный интерес, поскольку их жесткая структура обеспечивает эффективное π -сопряжение, высокую проводимость, устойчивость к окислению и плотную молекулярную упаковку [3].

В работе синтезирован ряд полупроводниковых олигомеров Д-А строения, в основе которых лежат донорные гетероароматические фрагменты: известный бензотиено[3,2-Ь]бензотиофен [4] и индол[3,2-Ь]индол. В качестве акцепторных групп использованы кето- и дициановинильные фрагменты, а роль сопряженных π -спейсеров, связывающих Д и А части молекул, выполняют бензольные звенья. Будут показаны схемы синтеза новых полупроводниковых олигомеров и результаты исследований их физико-химических свойств: электрохимических, оптических и термических, фазового поведения. На базе представленных данных будут выявлены взаимосвязи между структурой и конечными свойствами полученных веществ, какое влияние оказывают составные части и их смена на физико-химические свойства, проведено сравнение двух донорных блоков между собой, оценено влияние гетероатомов серы и азота. Выявленные взаимосвязи позволят сделать выводы о том, как можно контролировать и добиваться желаемых свойств у органических полупроводников данного типа. А также произведена оценка возможностей и перспектив применения полученных материалов в приложениях органической электроники.

Литература

1. Bronstein H., Nielsen C.B., Schroeder B.C. Nature Reviews Chemistry. 2020, **4**, 66-77.
2. Toshiki H., Takehiko M. Phys. Chem. Chem. Phys. 2022, **24**, 9770-9806.
3. Zhang W., Liu Y., Yu G. Advanced Materials. 2014, **26**, 6898-6904.
4. Fedorenko R.S., Poletavkina L.A., Trukhanov V.A., Kuklin K.N., Balakirev D.O., Dyadishchev I.V., Saratovsky N.S., Bakirov A.V., Ponomarenko S.A., Luponosov Yu.N., Paraschuk D.Yu. and. Sosorev A. Phys. Chem. Chem. Phys. 2025, **27**, 12119-12128.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (FFSM-2024-0003).

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ С ВЫСОКИМ ВКЛАДОМ НЕВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА ОСНОВЕ ПИРАЗИНА

Портнов С.В.^{а,б}, Шуваев А.Д.^а, Ферштат Л.Л.^а

^аИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия.

^бВысшая школа экономики, Факультет химии, Москва, Россия.

e-mail: sv_portnov@mail.ru

Одной из тенденций последних лет в области создания высокоэнергетических материалов является сборка структур типа “гость-хозяин”, молекулярных комплексов и сокристаллов. Неоспоримым достоинством данного подхода можно считать возможность минимизации потребности в молекулярном дизайне для тонкой настройки физико-химических характеристик и специальных параметров материала на этапе синтеза.

До настоящего времени гидроксилламинный фрагмент оставался в тени более популярных и широко используемых эксплозифорных групп, таких как азидо-, нитрозо- и нитрогруппы. Традиционно данный мотив встречается в роли стабилизирующего гидроксилламмонийного катиона, но не рассматривается в роли функциональной группы. Между тем, введение данной группы в состав соединения не изменяет общего кислородного баланса системы, зато повышает энтальпию образования и, благодаря амбивалентным свойствам и высокой реакционной способности NHOH-фрагмента, расширяет спектр возможных модификаций таких производных. В настоящей работе был разработан подход к синтезу 2,6-дигидроксилламино-3,5-динитропиразина (1), а также получено семейство комплексов на его основе.

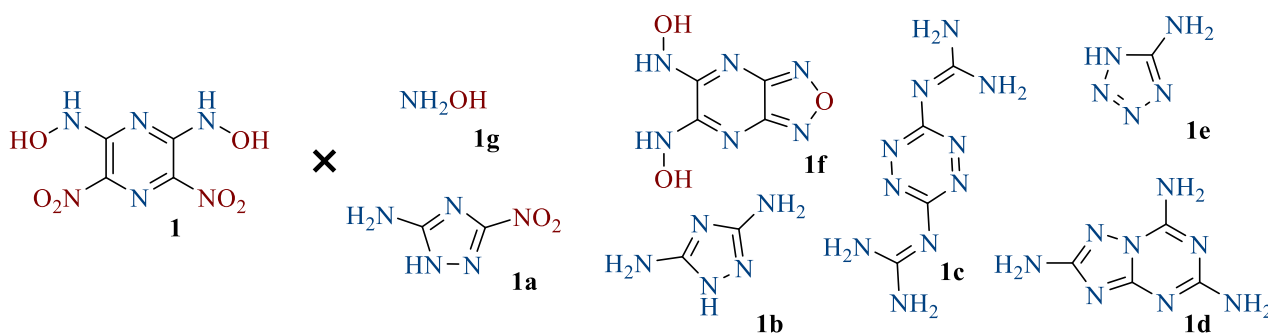


Рисунок 1. 2,6-дигидроксилламино-3,5-динитропиразин (1) и комплексы на его основе (1a-g)

Также в рамках развития данного направления была исследована возможность создания гибридных молекулярных систем, содержащих тетразоло[1,5-а]фуразано[3,4-б]пиразиновый каркас. Использование аминокетолов, нивелирующих высокую чувствительность гетаренового каркаса, не снижает при этом высокой энергоэффективности системы. Данный подход позволил получить новые материалы, объединяющие высокоэнтальпийный тетразоло[1,5-а]фуразано[3,4-б]пиразиновый остов и стабилизирующие агенты из числа азолов.

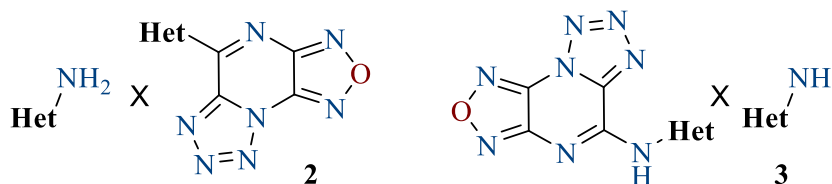


Рисунок 2. Сокристаллы на основе тетразоло[1,5-а]фуразано[3,4-б]пиразинового остова

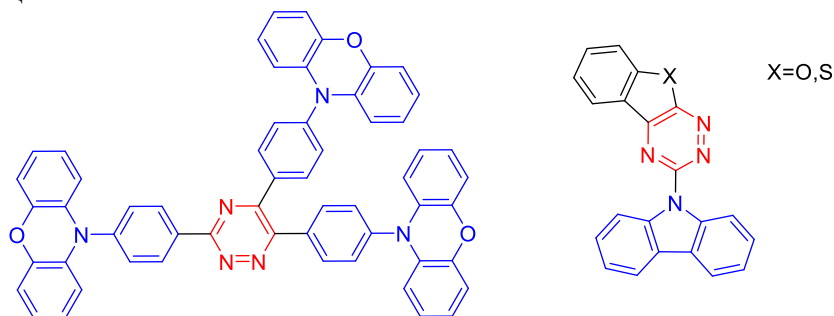
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-43-00090).

СИНТЕЗ И ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 5-АМИНОАРИЛ-1,2,4-ТРИАЗИНОВ

Потапова А.П., Шарапов А.Д., Гурина Е.М., Халымбаджа И.А., Фатыхов Р.Ф.

Уральский Федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия
E-mail: a.p.potapova@urfu.ru

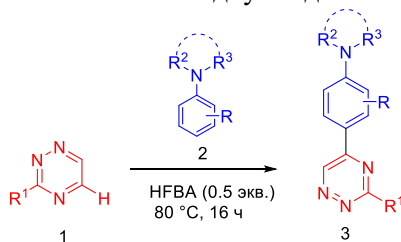
Азагетероциклические производные ароматических аминов, содержащие пиридиновые, диазиновые или 1,3,5-триазиновый фрагмент, нашли свое применение в качестве люминесцентных материалов. В последнее время амбиполярные органические молекулы на основе 1,2,4-триазинового ядра привлекают все большее внимание для применения в оптоэлектронике. Например, 1,2,4-триазин-феноксазиновые триады и конденсированные 1,2,4-триазины, содержащие карбазол (рис. 1), проявляют термически активированную замедленную флуоресценцию.



источники замедленной флуоресценции для OLED-дисплеев

Рисунок 1.

Нами было найдено, что 5-аминоарил-1,2,4-триазины **3** могут быть получены по реакции кросс-дегидрогенизационного сочетания 1,2,4-триазинов **1** с ароматическими аминами **2** в присутствии 0.5 экв. гептафтормасляной кислоты (HFBA). Предложенный метод синтеза соответствует принципам «зеленой химии» и позволяет получить продукты сочетания **3** в одну стадию с хорошими выходами.



R1: SAlkyl; PMP; thiophen-2-yl; pyrazin-2-yl; pyridin-2-yl; pyrimidin-2-yl;
NR₂R₃: NH₂; NPh₂; NMe₂; NBn₂; carbazol-3-yl; indolin-5-yl; carbazol-3-yl; phenothiazin-3-yl;
R: OMe; CN; Me; NO₂, Ph;

Схема 1.

Изучены фотофизические свойства наиболее перспективных флуорофоров. Максимумы длин волн абсорбции в дихлорметане находятся в диапазоне 401–415 нм, эмиссии в области 494–591 нм, абсолютные квантовые выходы люминесценции варьируются от 10 % до 42 %. При использовании двухфотонного возбуждения значения $\sigma_{\text{ТРЕ}}$ достигали 39 ГМ, а значения $\sigma_{\text{ТРА}}$ 68 – 331 ГМ.

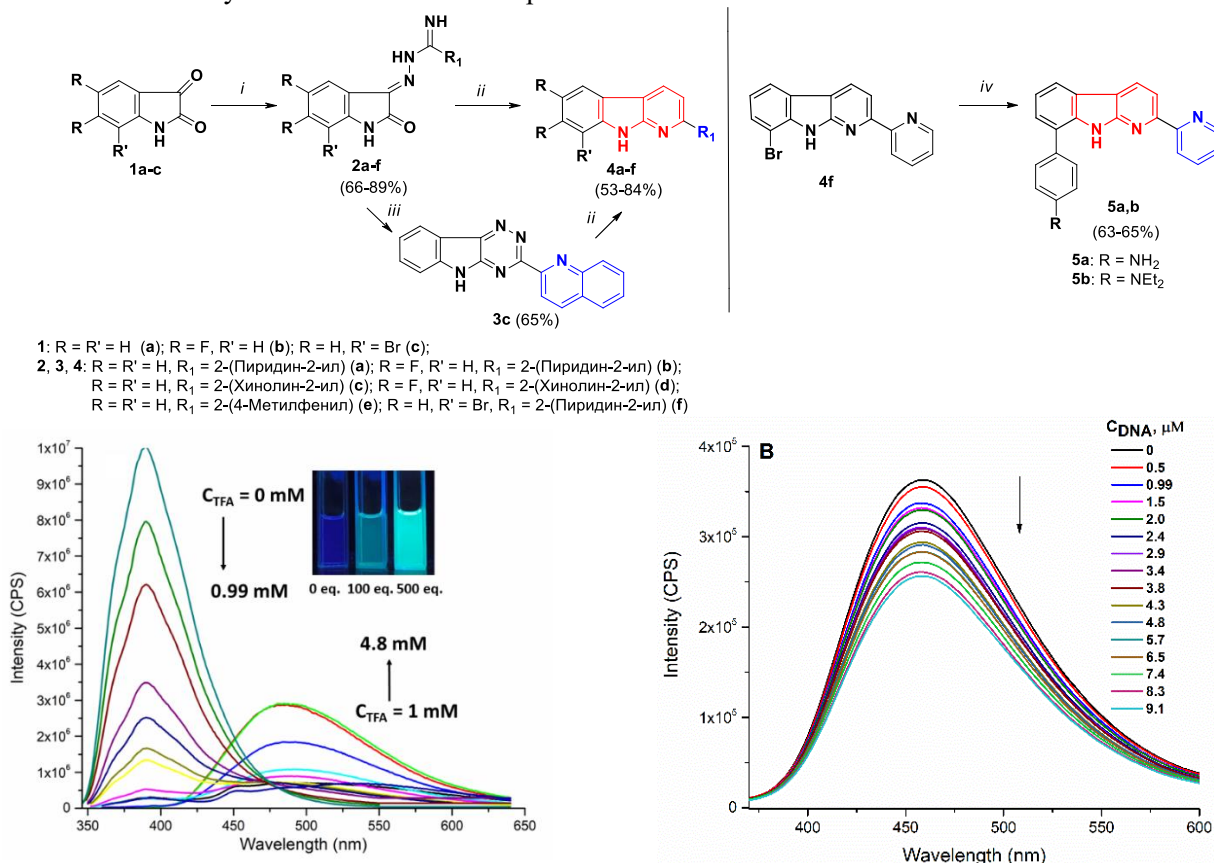
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-73-10050).

НОВЫЕ 9H-ПИРИДО[2,3-b]ИНДОЛЫ, СИНТЕЗ, ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В КАЧЕСТВЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ ЗОНДОВ

**Потапова С.С., Валиева М.И., Сайфутдинова Ю.М., Тания О.С.,
Копчук Д.С., Зырянов Г.В.**

Химико-технологический институт, Уральский Федеральный Университет,
ул. Мира 19, 620002, Екатеринбург, Россия
e-mail: svetlana.rybakova@urfu.ru

Нами была разработана серия новых флуорофоров на основе 9H-пиридо[2,3-b]индола **4a-e**, **5a,b** и изучены их фотофизические свойства. Экспериментальные данные и теоретические расчеты основного и возбужденного состояний соединений показали, что пиридоиндолы **4a-e** демонстрируют планаризованное внутримолекулярное состояние переноса заряда (PLICT), которое сопровождается постепенным увеличением квантового выхода люминесценции для образца **4d** с увеличением полярности растворителя. Зонд **4b** с $pK_a = 5.5$, показал высокую чувствительность к локальным изменениям pH в микросреде. Для соединений **4d** и **5a** наблюдался ацидохромный "turn-off" отклик с константами Штерна-Фольмера, равными 1.6×10^3 и $5.5 \times 10^3 \text{ M}^{-1}$ соответственно, в то время как для соединений **4b** и **5b** при титровании TFA был обнаружен "turn-on" отклик. Фотофизические исследования взаимодействия зонда **4b** с ДНК тимуса телят (ctDNA) показали наличие статического тушения эмиссии **4b** с образованием комплекса **4b**-ctDNA.



Спектр эмиссии **4b** ($c = 10^{-5} \text{ M}$) при постепенном добавлении TFA

Фотометрическое титрование **4b** ($c = 10^{-5} \text{ M}$) ctDNA в буфере PBS (pH=7.4; c 1% DMSO (v/v))

Литература

1. M.I. Valieva, E. A. Kudryashova, S. S. Potapova, et al, *Chem. Asian J*, 2025, e202500573.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 23-13-00318).

СИНТЕЗ ОКСАТИАМАКРОЦИКЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТЫ 2(5H)-ФУРАНОНА, 1,3-ПРОПАНДИОЛА И ДИТИОЛОВ

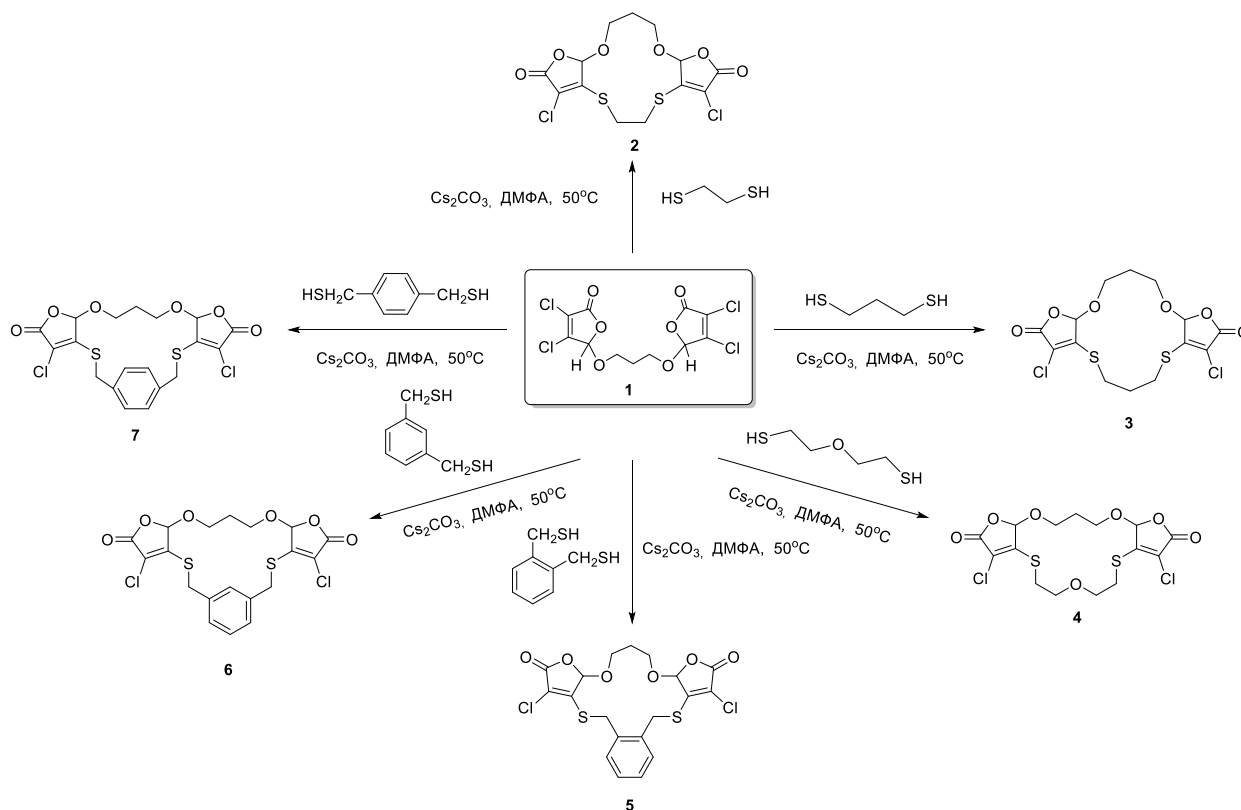
**Раббаниева Э.С.^а, Тимербаева Г.Р.^а, Герасимова Д.П.^б, Хабибрахманова А.М.^а,
Лодочникова О.А.^б, Курбангалиева А.Р.^а**

^аКазанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казань, Россия.

^бИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – ОСП ФИЦ КазНЦ РАН,
Казань, Россия.

e-mail: EnSRabbanieva@kpfu.ru

Данная работа посвящена разработке метода получения оксатиамacroциклических соединений на базе производного 2(5H)-фуранона и различных дитиолов. На первом этапе работы синтезирован исходный бис-эфир **1** в виде эквимольной смеси двух диастереомеров в реакции 5-гидрокси-3,4-дихлор-2(5H)-фуранона с 1,3-пропандиолом в условиях кислотного катализа. Далее соединение **1** было вовлечено в реакции с серосодержащими бинуклеофильными реагентами (этан-1,2-дитиол, пропан-1,3-дитиол, 2,2'-оксидиэтантиол, региоизомерные фенилендиметантиолы), которые проводили в присутствии карбоната цезия в условиях высокого разбавления в ДМФА. В результате получены новые оксатиамacroциклические соединения **2–7** состава 1 + 1, несущие фрагмент ненасыщенного лактона. В большинстве случаев выделены индивидуальные мезо-изомеры и d,l-пары энантиомеров. Строение всех новых макроциклов доказано методами спектроскопии ИК, одномерной и двумерной спектроскопии ЯМР. Молекулярная структура 10 синтезированных соединений охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-00261,
<https://rscf.ru/project/24-73-00261>.

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ХАЛЬКОГЕНА (S, Se) НА СТРУКТУРНЫЕ, ОПТИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ 1,2,5-ХАЛЬКОГЕНАДИАЗОЛОВ В РАЗЛИЧНЫХ ФОРМАХ

Радюш Е.А.^а, Коршунов В.М.^{б,в}, Ферулёв А.И.^в, Иртегова И.Г.^а, Шундрин И.К.^а, Семенов Н.А.^а, Тайдаков И.В.^б, Шундрин Л.А.^а, Зибарев А.В.^а

^аНовосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского Отделения Российской Академии Наук, 630090, Россия, Новосибирск, проспект Лаврентьева 9

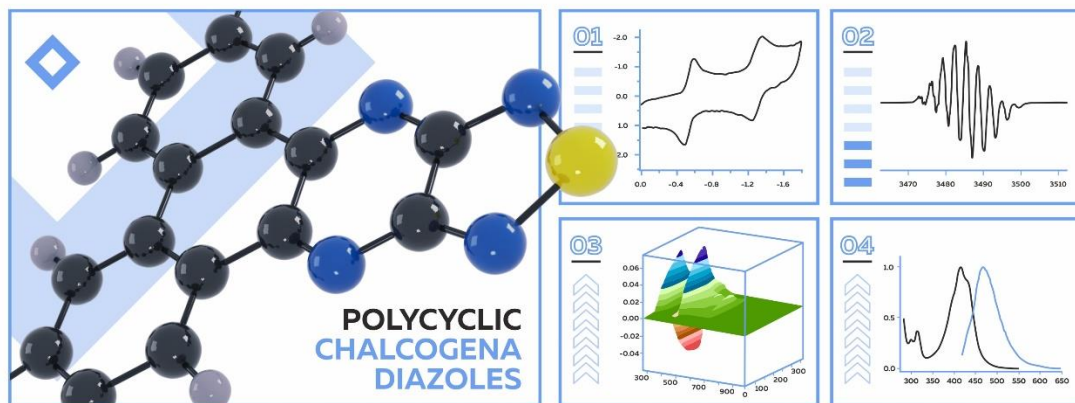
^бФизический институт им. П.Н. Лебедева Российской Академии Наук, 119991, Россия, Москва, Ленинский проспект 53

^вМосковский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, 105005, Россия, Москва, 2-я Бауманская улица 5

E-mail: iokimaru@nioch.nsc.ru

Полициклические 1,2,5-халькогенадиазолы (халькоген = S, Se) представляют собой перспективный класс органических π -красящих веществ, обладающих уникальным сочетанием термической стабильности, планарной структурой и выраженными оптическими и электрохимическими свойствами. Эти соединения, благодаря расширенной π -системе и варьiruемой природе халькогена, демонстрируют сильное поглощение и эмиссию в области UV-Vis-NIR, а также высокую электронную аффинность, что делает их эффективными акцепторами электронов и кандидатами для применения в органической оптоэлектронике и фотонике.

В данной работе комплексно исследованы структурные, оптические и окислительно-восстановительные свойства фенантрено[9,10-с][1,2,5]халькогенадиазолов и дибензо[*f,h*][1,2,5]халькогенадиазоло[3,4-*b*]хиноксалинов (E = S, Se) в нейтральных и анион-радикальных состояниях. Показано, что π -расширение и замещение серы на селен приводят к увеличению сродства к электрону, снижению потенциалов восстановления, а также к батохромному сдвигу полос поглощения и люминесценции. Анион-радикальные формы устойчивы и характеризуются отличительными спектральными признаками. Полученные результаты демонстрируют потенциал данных соединений как малых органических π -красителей и не-фуллереновых акцепторов электронов для современных оптоэлектронных устройств.



Литература

1. Radiush E.A., Korshunov V.M., Chulanova E.A., Konstantinova L.S., Ferulev A.I., Irtegov I.G., Shundrina I.K., Frank E.A., Semenov N.A., Taidakov I.V., Rakitin O.A., Shundrin L.A., Zibarev A.V. // Dyes and Pigments, 2025, Doi: 10.1016/j.dyepig.2025.112922

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-73-00367).

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ АЗИДОПРОИЗВОДНЫХ РЯДА 2(5H)-ФУРАНОНА И 3-ПИРРОЛИН-2-ОНА

**Сайгитбаталова Е.Ш.,^а Чарушин Н.С.,^а Герасимова Д.П.,^б Никифорова Д.Д.,^а
Лодочникова О.А.,^б Курбангалиева А.Р.^а**

^аКазанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казань, Россия.

^бИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова –
ОСП ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия.
e-mail: ESSajgitbatalova@kpfu.ru

Гетероциклические фрагменты 2(5H)-фуранона и его азотсодержащего аналога – 3-пирролин-2-она обнаружены в природных объектах и входят в состав многих синтезированных биологически активных соединений, проявляющих широкий спектр свойств. Кроме того, ненасыщенные лактоны и лактамы эффективно используются в качестве доступных субстратов в синтезе различных типов гетероциклических систем.

Данная работа посвящена направленному синтезу новых азот- и фосфорсодержащих производных из азидов ряда 2(5H)-фуранона и 3-пирролин-2-она, а также изучению их строения и свойств. В реакциях этерификации мукохлорной кислоты с алифатическими и галогенсодержащими спиртами, а также с *l*-ментолом получены 5-алкоксипроизводные 2(5H)-фуранона, действие на них азид натрия приводит к селективному образованию соответствующих азидофуранонов с группой N₃ в 4 положении ненасыщенного лактонного цикла. В реакциях азидов 2(5H)-фуранона с трифенилфосфином получены иминофосфораны, которые были переведены в новые 5-алкокси-4-амино-3-хлор-2(5H)-фураноны действием на них оловянной соли [1]. Показано, что удобным методом синтеза азидов ряда 3-пирролин-2-она является взаимодействие азотсодержащих нуклеофильных реагентов с 4-азидо-5-алкокси-2(5H)-фуранонами.

Новые гетероциклические системы, несущие фрагменты 1,2,3-триазола и ненасыщенного γ -лактона и / или γ -лактама получены в реакциях [3+2]-циклоприсоединения терминальных алкинов к 4-азидопроизводным ряда 2(5H)-фуранона или пирролинона в условиях катализа медью (I). Строение всех новых синтезированных соединений доказано методами спектроскопии ИК и ЯМР. Молекулярная и кристаллическая структура ряда гетероциклов охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа.

Проведена оценка способности синтезированных соединений подавлять рост бактериальной и грибковой микрофлоры. Для наиболее активных соединений изучен синергетический эффект с коммерческими фунгицидами. Для отдельных азотсодержащих производных фуранона и пирролинона оценена цитотоксичность по отношению к раковым и нормальным клеточным линиям. Выявлены молекулы, проявившие цитотоксическую активность по отношению к трем типам опухолевых клеток, сопоставимую с сорафенибом, и меньшую или сопоставимую цитотоксичность по отношению к нормальным клеткам, чем препарат сравнения.

Литература

1. E. S. Saigitbatalova, D. R. Fedorova, O. A. Lodochnikova, D. R. Islamov, I. D. Shutilov, K. S. Usachev, A. R. Kurbanalieva Russ. J. Gen. Chem., 2024, **94**, 835.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 23-73-10182).

СИНТЕЗ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИКАТИОННЫХ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПЕНТАЭРИТРИТА И ПИРИДОКСИНА

Сапожников С.В., Биктимирова А.С., Булатова Е.С.,
Штырлин Н.В., Агафонова М.Н., Штырлин Ю.Г.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

e-mail: SVSapozhnikov@kpfu.ru

По данным ВОЗ инфекционные заболевания остаются одной из основных причин смертности. Особую угрозу представляют штаммы микроорганизмов, устойчивые к существующим лекарственным препаратам [1]. Среди антисептиков особого внимания заслуживают четвертичные аммониевые соединения (ЧАС), которые демонстрируют высокую эффективность против практически всех микроорганизмов. Однако к данному классу соединений у микроорганизмов также вырабатывается резистентность.

Одним из современных подходов в медицинской химии к проблеме преодоления устойчивости микроорганизмов к ЧАС является молекулярный дизайн поликатионных ЧАС. Ранее в нашей исследовательской группе был получен широкий ряд моно- и бис-ЧАС на основе производных пиридоксина, обладающих высокой противомикробной активностью и низкой токсичностью *in vivo* [2]. В продолжение исследований в настоящей работе синтезировано более 30 новых ЧАС (Рисунок 1) на основе пентаэритрита и пиридоксина, являющихся удобными молекулярными остовами для получения поликатионных ЧАС.

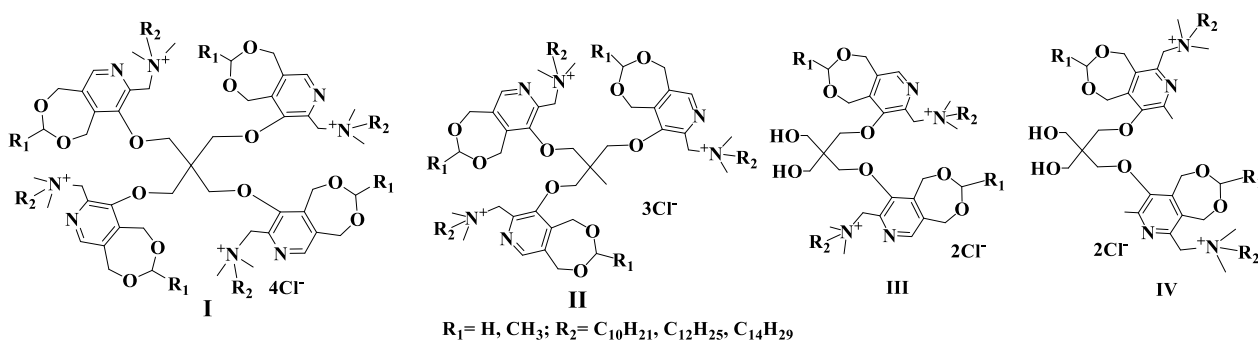


Рисунок 1. Структуры ЧАС на основе производных пентаэритрита и пиридоксина

Исследование антибактериального действия *in vitro* показало, что некоторые из соединений обладают превосходящей или сопоставимой с коммерческими антисептиками (бензалкония хлорид, хлоргексидин, мирамистин) активностью (МИК=1-32 мкг/мл) [3]. Исследование *in vivo* острой токсичности соединения-лидера (II: $R_1 = \text{H}$, $R_2 = \text{C}_{10}\text{H}_{21}$) при внутрижелудочном введении мышам показало, что оно обладает более низкой токсичностью ($\text{LD}_{50} = 1814 \text{ мг/кг}$) по сравнению с реперными антисептиками. В эксперименте по выработке резистентности на четырех клинических бактериальных штаммах (*E. faecalis*, *S. haemolyticus*, *K. pneumoniae*, *P. aeruginosa*) при 30-кратном пассировании в присутствии соединения-лидера формирования устойчивости не установлено.

Литература

1. I.N. Okeke, et al. *The Lancet*, 2024, **403** (10442), 2426-2438
2. N.V. Shtyrlin, et al. *Russ. J. Gen. Chem.*, 2024, **94**, 1879–1904.
3. А.С. Биктимирова и др. *Изв. АН. Сер. хим.*, **2025**, 74(5), 1371-1386.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности №FZSM-2025-0005.

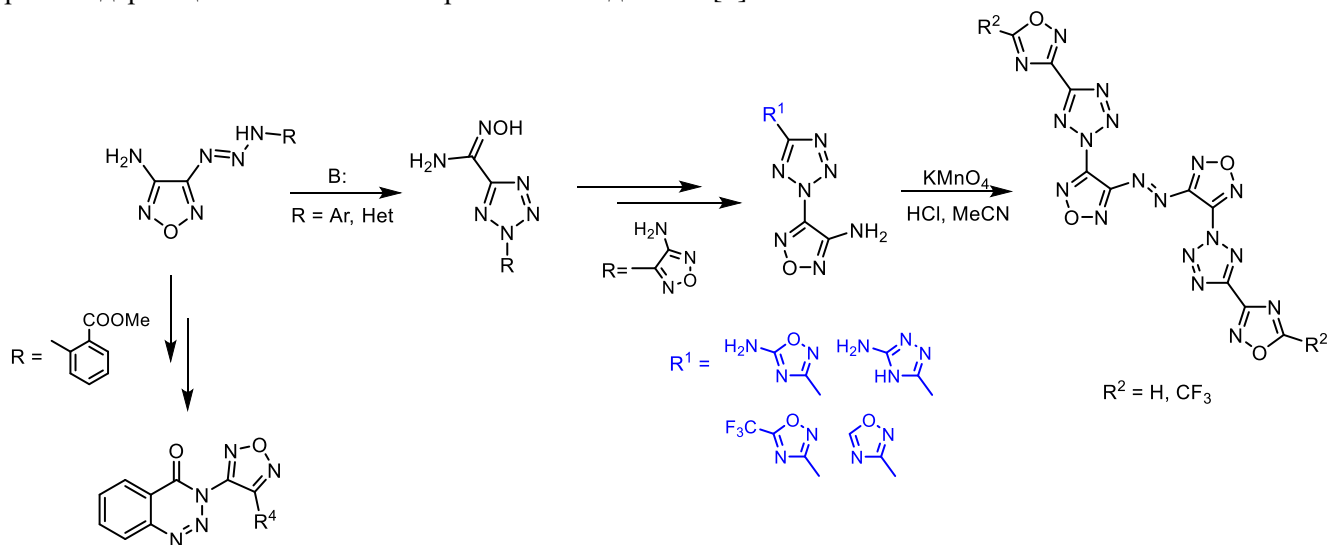
СИНТЕЗ, ИЗБРАННЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ФУРАЗАНИЛТРИАЗЕНОВ

Серeda В.А., Ферштат Л.Л.

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского, Москва, Россия.

e-mail: vera.sereda@gmail.com

Триазены – перспективный класс соединений-прекурсоров для синтеза азотсодержащих соединений. В нашей работе получен ряд несимметричных фуразанилтриазенов и изучены их превращения в соединения ряда 2,5-дизамещённого тетразола и бензотриазинона. Из полученных триазенов синтезированы новые фуразансодержащие полиазотные энергоёмкие соединения[1].



Литература

1. V.A. Sereda, E.V. Dubasova, I.V. Ananyev, E.K. Kosareva, L.L. Fershtat *Dalton Trans.*, 2025, **54**, 8870-8880.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-73-10151).

РЕАКЦИИ 3-АРИЛИДЕН-1-ПИРРОЛИНИЕВЫХ СОЛЕЙ С
C-, N-, P-НУКЛЕОФИЛАМИ

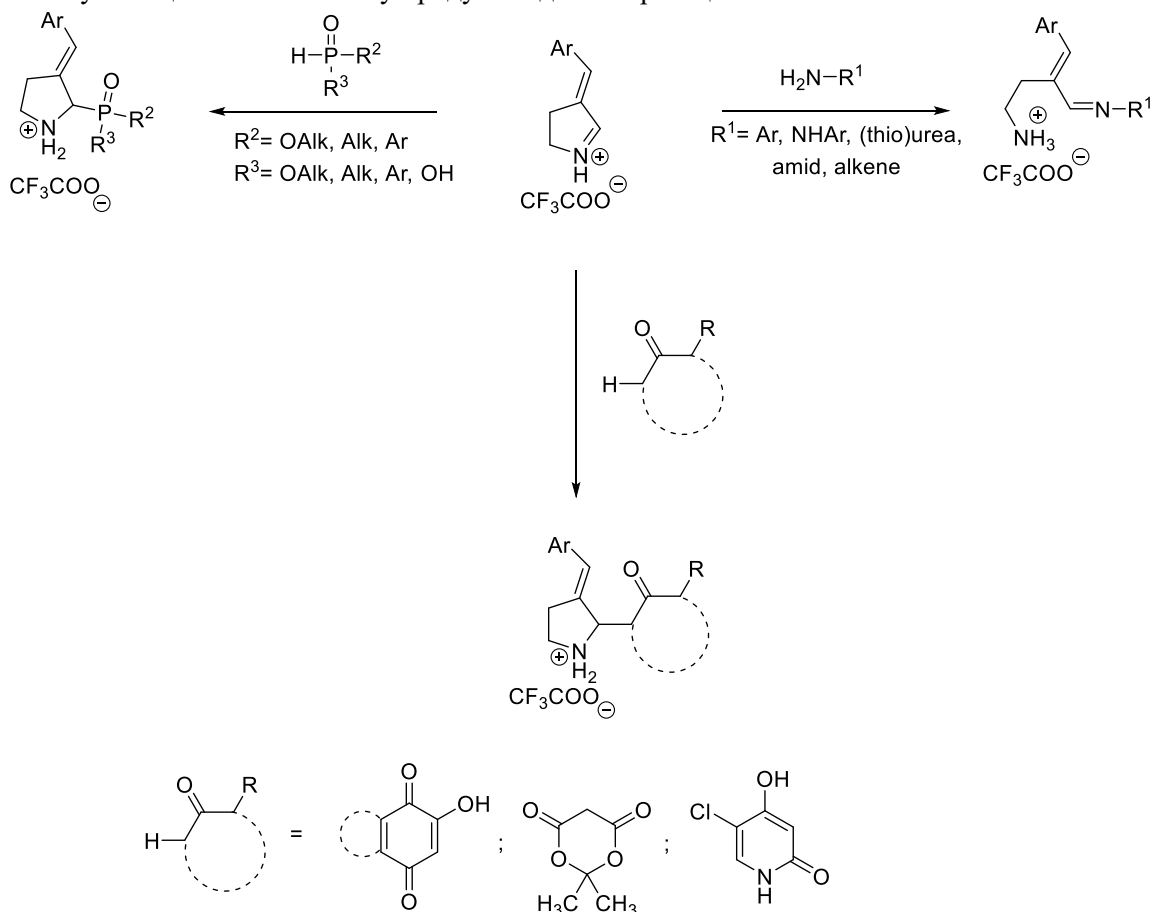
Сидлярук Н.А.^а, Широков В.О.^б, Емельянова В.А.^б, Смолобочкин А.В.^а,
Газизов А.С.^а, Бурилов А.Р.^а, Пудовик М.А.^а

^а Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,
Казань, Россия

^б Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия
e-mail: chem@sidlyaruk.ru

Исследование химии циклических иминов является важной и актуальной задачей, поскольку в результате их реакций образуются новые биологически активные соединения. Поэтому разработка новых, более простых и удобных способов получения соединений с полезными свойствами остаётся одной из важных задач современной синтетической химии.

Были изучены реакции 3-арилиден-1-пирролинов с широким рядом нуклеофильных субстратов различной природы. В качестве C-нуклеофилов выступили: производные 2-гидроксинафтохинона, Гимерацил и кислота Мельдрума; N-нуклеофилов: 2,3-диаминомалеонитрил, производные гидразина и гидразида; P-нуклеофилов: различные гидрофосфорильные соединения. Показаны, синтетические возможности 3-арилиден-1-пирролинов. Изучена цитотоксичность у продуктов данных реакций.



ИССЛЕДОВАНИЕ ФЛУОРЕСЦИРУЮЩИХ СВОЙСТВ НОВЫХ ПРЕДСТАВИТЕЛЕЙ ГИДРАЗОНОВ
ОКСАЗОЛ-5-(4H)-ОНА

Скляр А.Е., Гринёв В.С.

ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н. Г. Чернышевского», Саратов, Россия
e-mail: annasklyar2502@gmail.com

В настоящее время повышенное внимание уделяется разработке новых органических красителей, обладающих не только окрашивающими, но и флуоресцентными свойствами. Такие соединения находят широкое применение в современной науке и технологиях — в том числе в биоимиджинге, сенсорике, фотонике и создании оптоэлектронных устройств [1,2]. Особый интерес представляют малые органические молекулы, способные к эффективному испусканию в видимой области спектра.

Среди них перспективными объектами являются гидразоны оксазол-5(4H)-она, которые были получены нами по реакции азосочетания с гетеро- и карбоциклическими аминами.

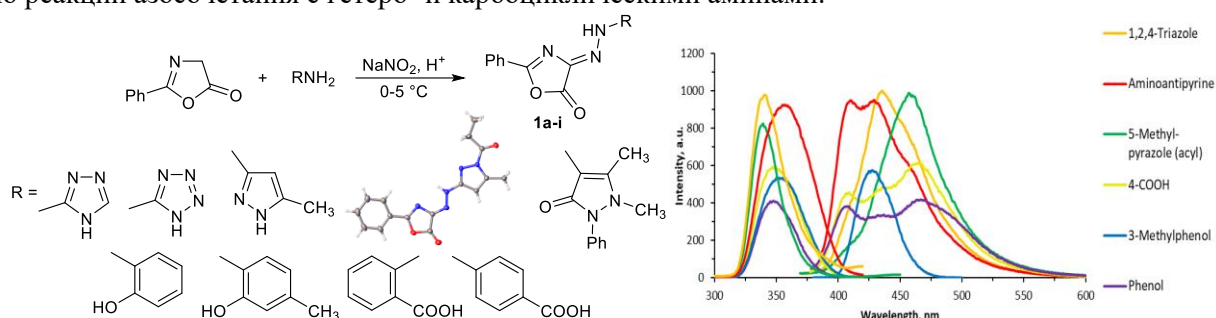


Рис. 1 Схема синтеза и спектры возбуждения и испускания гидразонов оксазол-5(4H)-она 1

Анализ спектров флуоресценции (рис.1) позволяет констатировать, что все изученные гидразоны обладают большим стоксовым сдвигом (53-120 нм), а также при переходе от карбоциклических заместителей к гетероциклическим наблюдается значительное повышение интенсивности флуоресценции, что можно связать с расширением цепи сопряжения и общей планарности гетероциклических фрагментов.

Следует отметить, что для гидразонов с аминокантипириновым, фенольным (ОН) и карбоксильным (4-COOH) заместителями в ароматическом фрагменте в спектрах испускания наблюдаются два или более максимумов. Это может свидетельствовать о существовании нескольких типов возбужденных состояний и указывает на необходимость дальнейшего изучения механизмов флуоресценции этих соединений.

Таким образом, исследованные соединения обладают высокой интенсивностью флуоресценции, которая зависит от природы заместителя и его строения.

Литература

1. T. A. Khattab *Mater. Chem. Phys.*, 2020, **254**, 123456.
2. J. de Oliveira Carneiro Brum, T. C. França, S. R. LaPlante, J. D. F Villar *Mini-Rev. Med. Chem.*, 2020, **20(5)**, 342-368.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00482).

НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ 4*H*-ТИОПИРАНО[2,3-*b*]ХИНОЛИН-3-КАРБАЛЬДЕГИДОВ, ЯВЛЯЮЩИХСЯ ПОТЕНЦИАЛЬНЫМИ ЛЕКАРСТВЕННЫМИ КАНДИДАТАМИ ПРОТИВОВИРУСНОГО ДЕЙСТВИЯ

Скрыльникова М.А.^{а,б}, Храмчихин А.В.^{а,б}, Зарубаев В.В.^в, Островский В.А.^{а,б}

^а Санкт-Петербургский Федеральный исследовательский центр Российской академии наук, научно-исследовательский центр экологической безопасности, Санкт-Петербург, Россия

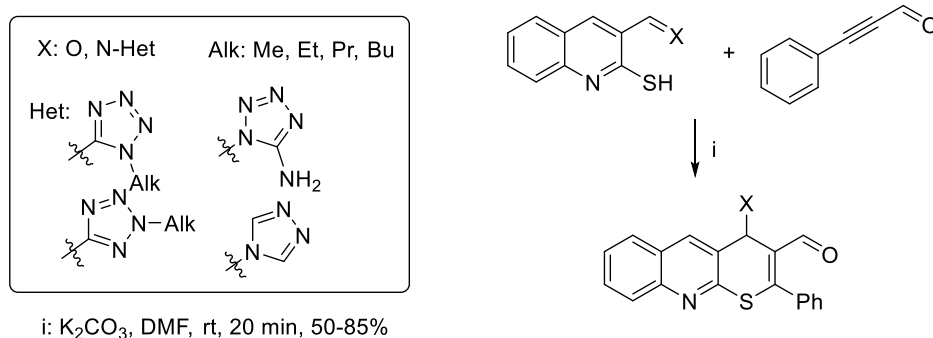
^б Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия.

^в Санкт-Петербургский НИИ эпидемиологии и микробиологии им. Пастера, Санкт-Петербург, Россия.

e-mail: mari954@mail.ru

Одной из приоритетных задач современной медицины является разработка новых, противовирусных лекарственных средств [1]. Процесс разработки лекарственных средств включает множество этапов и наиболее значимыми являются поиск активных структур и построение эффективной стратегии их синтеза, от которых зависит успех всего проекта.

В рамках наших исследований были изучены 4*H*-тиопирано[2,3-*b*]хинолин-3-карбальдегиды как перспективные противовирусные активные ингредиенты лекарственных средств. Было показано, что канал М2 и белок РВ2 вируса гриппа А/Puerto Rico/8/34 (H1N1) являются наиболее предпочтительными мишенями. Была разработана стратегия синтеза 4-замещённых 4*H*-тиопирано[2,3-*b*]хинолин-3-карбальдегидов, основанная на тандемной реакции 3-фенилпроп-2-иналя с 2-меркаптохинолин-3-карбальдегидами и их азометиновыми производными. Изначально в качестве катализатора применялся триэтиламин, выступающий как депротонирующий агент и, предположительно, как нуклеофильное основание в последующей реакции Морита-Бейлиса-Хиллмана. Однако в ходе дальнейших исследований было показано, что триэтиламин участвует только как депротонирующий реагент, что позволило заменить его на менее токсичный K₂CO₃.



Проведённые *in vitro* исследования против вируса гриппа А/Puerto Rico/8/34 (H1N1) позволили выявить три соединения-лидера с выраженной противовирусной активностью.

Литература

1. Киселев О.И. Химиопрепараты и химиотерапия гриппа. СПб: Росток: 2012. 272 с.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 23-13-00224).

3-АРИЛИДЕН-1-ПИРРОЛИНЫ В СИНТЕЗЕ КОНДЕНСИРОВАННЫХ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

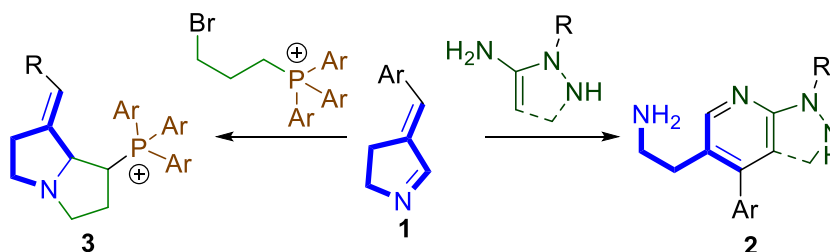
**Смолобочкин А.В.^а, Газизов А.С.^а, Ризбаева Т.С.^а, Сидлярук Н.А.^а,
 Фоменко Е.А.^б, Бурилов А.Р.^а, М.А. Пудовик^а**

^а *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ
 Казанский научный центр РАН*

^б *Казанский (Приволжский) федеральный университет
 e-mail: Smolobochkinav@mail.ru*

Конденсированные азотсодержащие гетероциклические соединения привлекают пристальное внимание исследователей благодаря ярко выраженной биологической активности и широким возможностям использования в медицинской практике.

Перспективной платформой для синтеза конденсированных гетероциклических соединений являются производные 3-арилиден-1-пирролина **1** [1,2]. Это связано с наличием трёх реакционных центров в молекуле: нуклеофильный атом азота, эндоциклическая иминная связь с электрофильным атомом углерода и экзоциклическая двойная связь. Сочетание трех реакционных центров открывает возможности для различных внутри- и межмолекулярных реакций и делает их прекурсорами для одnoreакторного синтеза сложных полигетероциклических молекул **2,3**.



Литература

1. T.S. Rizbayeva, A.V. Smolobochkin, A.S. Gazizov, J.K. Voronina, V.V. Syakaev, D.P. Gerasimova, O.A. Lodochnikova, S.V. Efimov, V.V. Klochkov, A.R. Burilov, M.A. Pudovik. *J. Org. Chem.*, 2023, **88**, 11855.
2. A. Smolobochkin, A. Gazizov, N. Sidlyaruk, N. Akylbekov, R. Zhapparbergenov, A. Burilov. *Int. J. Mol. Sci.*, 2025, **26**, 288.

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОМУ СИНТЕЗУ РАДИКАЛОВ БЛАТТЕРА И [1,2,4]ТРИАЗОЛО[4,3-*b*][1,2,4]ТРИАЗОЛОВ

Соколов А.Е., Ферштат Л.Л.

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47,
e-mail: begoe1703@yandex.ru

Результаты отечественных и зарубежных исследований последнего десятилетия указывают на ряд существенных преимуществ азотсодержащих гетероциклических структур в дизайне новых материалов по сравнению с ациклическими или карбоциклическими молекулярными системами. К числу таких преимуществ относятся, прежде всего, высокая термическая стабильность, возможность стабилизации неспаренного электрона, сбалансированность физико-химических свойств. В этом отношении электрохимия, переживая ренессанс в последние годы, является привлекательной, предлагая экологически перспективный, практичный и атом-экономичный подход для создания полиазотных гетероциклических систем и новых функциональных материалов на их основе.

В настоящей работе нами предложен прямой подход к конструированию производных [1,2,4]триазоло[4,3-*b*][1,2,4]триазола **3** на основе трансформации 5-амино-1,2,4-триазолов **1** в соответствующие гидразоны **2** с последующим электрохимическим окислением (рис.1).

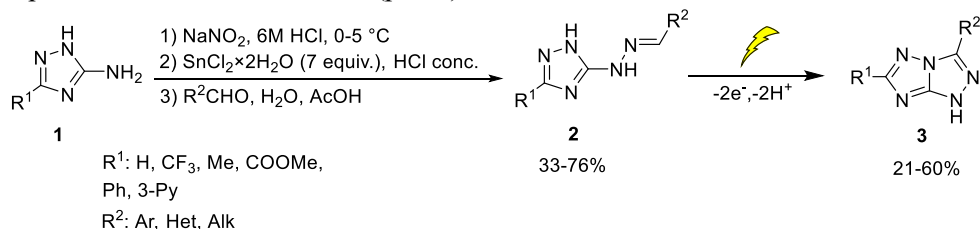


Рисунок 1. Электрохимический синтез [1,2,4]триазоло[4,3-*b*][1,2,4]триазолов **3**.

Кроме того, нами разработан метод получения 1,2,4-бензотриазинильных радикалов Блаттера **5** в условиях анодного окисления соответствующих амидразонов **4** (рис.2).

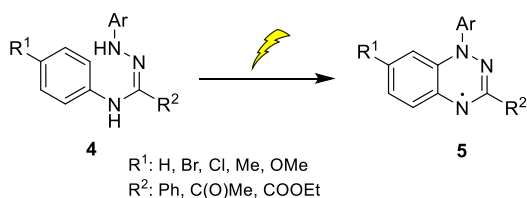


Рисунок 2. Электрохимический синтез радикалов Блаттера.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 24-73-10151).

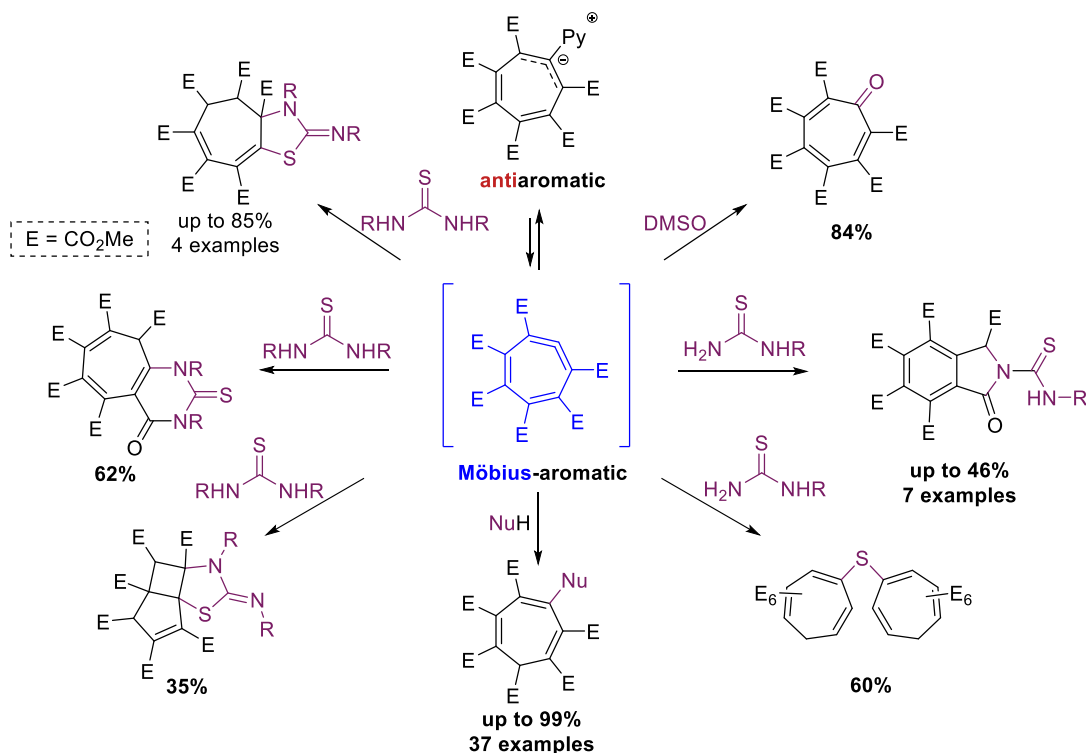
СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И УНИКАЛЬНАЯ РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ЭЛЕКТРОНОДЕФИЦИТНЫХ ЦИКЛОГЕПТАТРИЕНИДОВ

Соколова А.Д., Белый А.Ю., Платонов Д.Н., Томилов Ю.В.

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия.

e-mail: alenasokolova@ioc.ac.ru

Гекса(метоксикарбонил)циклогептатриенилид пиридиния – соединение, имеющее цвиттер-ионную структуру и обладающее уникальной реакционной способностью [1]. Он легко вступает в реакции с широким кругом нуклеофилов, что приводит к замещению пиридина в циклогептатриенидном фрагменте. Данная реакция протекает как тандемное отщепление-присоединение и является первым примером нового класса реакций нуклеофильного антиароматического замещения S_NA_{Ag} . Ключевым интермедиатом данного процесса является Мёбиус-ароматический циклогептатетраен [2, 3]. При его взаимодействии с нуклеофилами, содержащими несколько реакционных центров, запускается каскад перегруппировок, приводящих к широкому кругу карбо- и гетероциклических соединений. При этом практически во всех случаях наблюдается высокая регио- и диастереоселективность.



Литература

1. M. K. Ilyushchenko, R. F. Salikov, A. D. Sokolova, V. V. Litvinenko, A. Y. Belyy, D. N. Platonov, Y. V. Tomilov. *J. Org. Chem.*, 2023, **88**, 5661.
2. A. D. Sokolova, D. N. Platonov, A. Y. Belyy, R. F. Salikov, K. S. Erokhin, Y. V. Tomilov. *Org. Lett.*, 2024, **26**, 5877.
3. R. F. Salikov, A. D. Sokolova, D. N. Platonov, A. Y. Belyy, M. D. Khitrov, Y. V. Tomilov. *Asian J. Org. Chem.*, 2025, **14**, e202500119.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-73-10181).

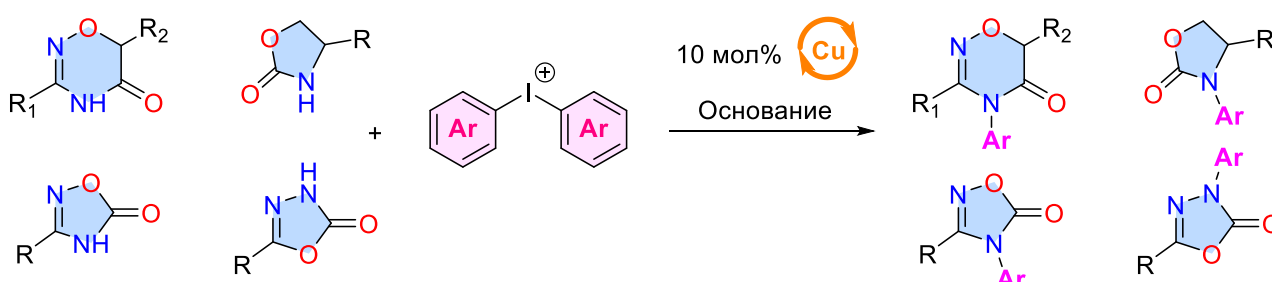
N-АРИЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИОДОНИЕВЫХ СОЛЕЙ

Солдатова Н.С.^а, Семенов А.В.^{а,б}, Байков С.В.^б, Постников П.С.^а

^а Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050, Россия, г. Томск, проспект Ленина, дом 30

^б Санкт-Петербургский государственный университет,
199034, Россия, Санкт-Петербург, Университетская набережная, 7-9
e-mail: soldatovans@tpu.ru

Азотсодержащие гетероциклы, представляющие собой значимый класс органических соединений, применяющийся в фармакологии и медицинской химии, характеризуются большим разнообразием структур. За счет большого разнообразия гидроциклов значительно усложняется процесс выбора эффективных стратегий их функционализации, в частности методов введения арильных заместителей.



Особенно затруднительными является введение арильного фрагмента в гетероциклы, содержащие атом азота с низкой нуклеофильностью, что требует жестких условий реакции. В частности, традиционный метод N-арилирования – реакция Ульмана часто подразумевает использование высоких температур в сочетании со специфическими каталитическими системами на основе меди.

Использование более активных доноров электрофильного арила – диарилиодониевых солей является альтернативным подходом к арилированию. Данный подход позволяет одновременно снизить температуры протекания процесса и не требует использования сложных катализаторов.

В рамках данной работы мы показали, что диарилиодониевые соли могут использоваться для арилирования различных азотсодержащих гетероциклов в том числе оксадиазолонов, оксазолидинонов и оксадиазинонов.

Литература

1. Soldatova, N. S., Semenov, A. V., Geyl, K. K., Baykov, S. V., Shetnev, A. A., Konstantinova, A. S., Korsakov M.M., Yusubov M.S., Postnikov, P. S. *Adv. Synth. Catal.*, **2021**, 363(14), 3566.
2. Podrezova, E. V., Okhina, A. A., Rogachev, A. D., Baykov, S. V., Kirschning, A., Yusubov, M. S., Soldatova N.S., Postnikov, P. S. *Org. Biomol. Chem.*, **2023**, 21, 1952.
3. Presnukhina, S. I., Baykova, S. O., Chukanova, E. A., Metalnikova, N. M., Baykov, S. V., Soldatova, N. S., Postnikov P.S., Boyarskiy, V. P. Copper-catalyzed N-arylation of 1, 2, 4-oxadiazin-5 (6 H)-ones by diaryliodonium salts. *Org. Biomol. Chem.*, **2025**, 23, 4217.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 21-73-20031-П).

РАЗРАБОТКА НОВЫХ СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ К ФОТОАКТИВИРУЕМЫМ ПРОЛЕКАРСТВАМ Pt(IV) ДВОЙНОГО ДЕЙСТВИЯ НА ОСНОВЕ BODIPY И ГЕПТАМЕТИНЦИАНИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ

Спектор Д.В.^а, Жарова А.О.^а, Каретников Г.Л.^а, Исаева Ю.А.^б, Акасов Р.А.^б, Ипатов Д.А.^а, Скворцов Д.А.^а, Белоглазкина Е.К.^а, Красновская О.О.^а

^аМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия.

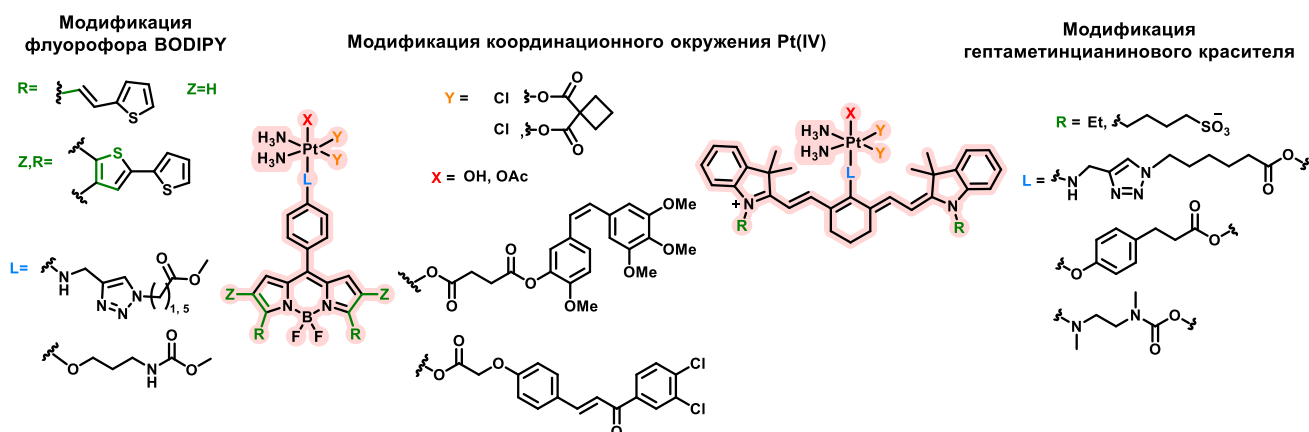
^бМосковский педагогический государственный университет, Москва, Россия

e-mail: danspector@yandex.ru

Флуорофоры на основе бор-дипиррометенов (BODIPY) и гептаметиновых цианиновых красителей на протяжении многих десятилетий применяются в биомедицине, в том числе для диагностики и терапии онкологических заболеваний.[1,2] Перспективной стратегией по созданию противоопухолевых агентов нового поколения является дизайн комплексов Pt(IV) с BODIPY или цианиновыми красителями в качестве аксиальных лигандов, которые действуют как пролекарства и способны высвобождать противоопухолевые агенты под действием света в ближнем ИК диапазоне [3].

В настоящей работе разработаны и оптимизированы новые синтетические подходы к созданию пролекарств Pt(IV) с цианиновыми красителями, проведён дизайн и синтез пролекарств Pt(IV) множественного действия с фотоактивными лигандами на основе BODIPY и цианиновых красителей. Для полученной серии пролекарств варьировалась природа BODIPY и цианинового красителя, а также тип линкера между фотоактивным лигандом и центром Pt(IV).

Показано, что в темноте конъюгаты Pt(IV) остаются стабильными, а под действием света высвобождают цисплатин и биоактивные лиганды, что приводит к гибели опухолевых клеток. В исследованиях биологической активности пролекарства Pt(IV) обладали минимальной активностью в темноте, однако проявляли высокую цитотоксичность под действием света в БИК-диапазоне, что делает полученные соединения перспективными противоопухолевыми агентами.



Литература

1. Iqbal, M.S.; Ahmad, H.; Yu, C.; Huang, H.; Guo, B. *Coord. Chem. Rev.* **2025**, *541*, 216781.
2. Zhang, J.; Wang, W.; Shao, J.; Chen, J.; Dong, X. *Coord. Chem. Rev.* **2024**, *516*, 215986.
3. Deng, Z.; Li, H.; Chen, S.; Wang, N.; Liu, G.; Liu, D.; Ou, W.; Xu, F.; Wang, X.; Lei, D.; et al. *Nat. Chem.* **2023**, *15*, 930–939.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-75-10014).

СИНТЕЗ НОВЫХ ФЛУОРОФОРОВ D-π-A МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ АЦЕНАФТО[1,2-*b*]ПИРИДИНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ – ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ TADF-ЭМИТТЕРОВ

Старновская Е.С.^а, Юртаева А.А.^а, Тания О.С.^а, Копчук Д.С.^{а,б}, Зырянов Г.В.^{а,б}

^аХимико-технологический институт, Уральский Федеральный Университет,
ул. Мира 19, 620002, Екатеринбург, Россия

^бИнститут Органического синтеза, Уральское отделение российской академии наук,
ул. С. Ковалевской 3, 620041 Екатеринбург, Россия
e-mail: katest5@yandex.ru

Термоактивируемые излучатели замедленной флуоресценции (TADF) в настоящее время имеют значительный интерес с точки зрения создания органических светодиодов (OLED), так как могут обеспечить 100% внутреннюю квантовую эффективность [1].

В данной работе продемонстрирован новый синтетический подход к получению аценафто[1,2-*b*]пиридиновых производных, как потенциальных TADF-эммиттеров, из коммерчески доступного 5-бромпиридинонитрила. Новые флуорофоры **4a-c** продемонстрировали перспективные фотофизические свойства с батохромным сдвигом относительно полярности растворителя до 568 нм для соединения **4b** и квантовыми выходами до 83% для соединения **4c**.

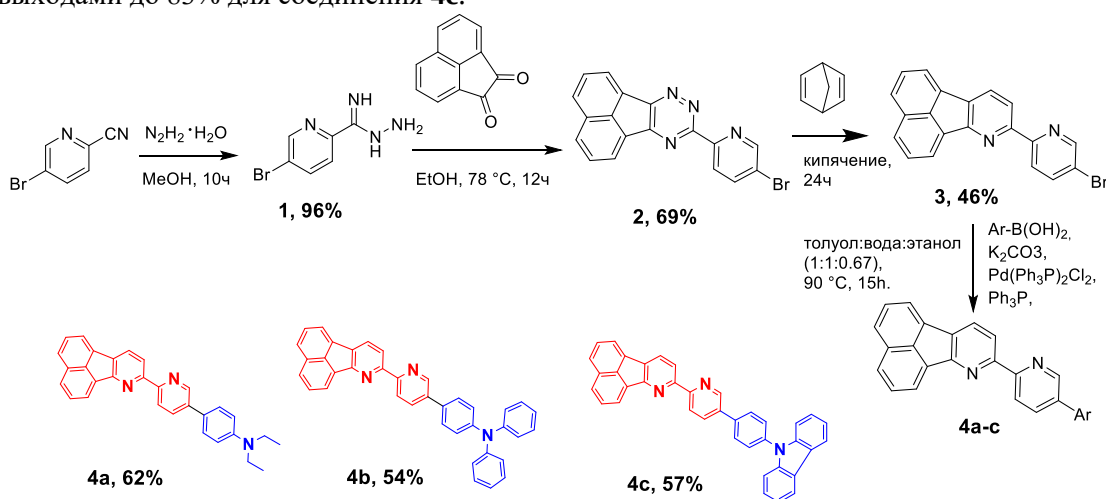


Табл.1. Данные поглощение и испускания **4a-c**

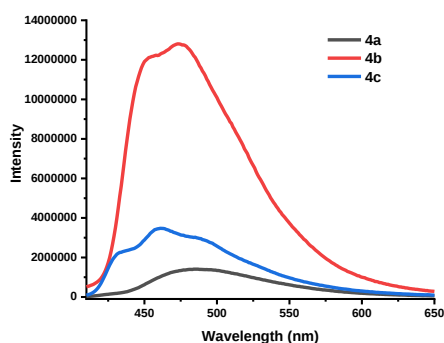


Рис. 1.

Спектры испускания **4a-c** в толуоле при к.т. ($C = 10^{-5}$ M)

Литература

1. В. А. Naqvi et al, *Front. Chem.* 2020, **8**, 750.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 23-13-00318).

№	Растворитель	λ_{abs} , нм ($\epsilon_M, 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$)	λ_{em}^a , нм	$\Delta\lambda^b$, нм	Φ_F^c , %
4a	Толуол	390 (0.29)	470	80	35.2 2
	Дихлометан	354 (0.53)	473, 573	219	43.8 9
4b	Толуол	369 (3.65)	409	40	73.1 7
	Дихлометан	365 (2.22)	568	203	33.9 6
4c	Толуол	330 (4.57)	462	132	31.0 9
	Дихлометан	342 (1.9)	467	125	83.3 0

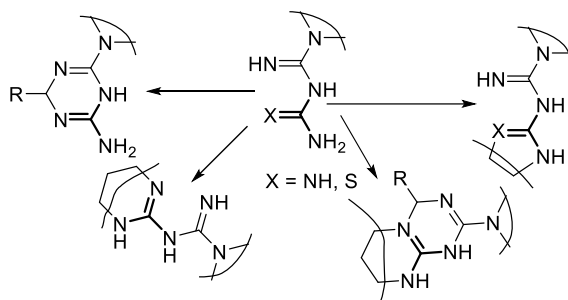
ПОЛИНУКЛЕОФИЛЬНЫЕ МОЛЕКУЛЫ КАК ПЛАТФОРМА
ДЛЯ СИНТЕЗА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВСтолповская Н.В., Шихалиев Х.С.

Воронежский государственный университет,
химический факультет, Воронеж, Россия.
e-mail: gusnv@yandex.ru

При разработке новых биологически активных соединений активно используется концепция гибридизации, основанная на сочетании в одной молекуле нескольких фармакофорных фрагментов, что часто приводит к усилению биологического действия [1-4].

Полинуклеофильные реагенты являются удобными платформами для получения на их основе гибридных молекул, сочетающих в своей структуре два и более различных гетероциклов. К таким полинуклеофилам относятся амидинотиомочевина и бигуаниды [5-6], которые в зависимости от электрофила могут выступать в качестве:

- 1,3-N,N-бинуклеофила, формируя имидазольный или пиримидиновый циклы в реакциях с биелектрофилами;
- 1,5-N,N-бинуклеофила, реагируя с моноэлектрофилами с замыканием 1,3,5-триазинового цикла;
- амидинотиомочевина может выступать в качестве 1,3-N,S-бинуклеофила, что позволяет получать производные тиазола или тиазина.



На основе амидинотиомочевины, бигуанидов и их структурных аналогов получена серия гибридных молекул, сочетающих в своей структуре пиримидиновый, 1,3,5-триазиновый, имидазольный, тиазольный циклы, а также дополнительные пиперидиновый, азепиновый, индольный, гидрохинолиновый и др. гетероциклические фрагменты. Изучена биологическая активность синтезированных соединений, в том числе антибактериальное, противовирусное и антикоагулянтное действие.

Литература

1. B. Meunier *Acc. Chem. Res.*, 2008, **41**, 69.
2. P. Prasher, M. Sharma, A.A. Aljabali, G. Gupta, P. Negi, D.N. Kapoor, K. Dua *Drug dev. Res.*, 2020, **81**, 837-858.
3. N. Desai, A. Trivedi, U. Pandit, A. Dodiya, V. Kameswara Rao, P. Desai *Mini-Rev. Med. Chem.*, 2016, **16**, 1500.
4. H. M. Diab, M. E. Salem, I. A. Abdelhamid, A. H. Elwahy *RSC Advances*, 2020, **10**, 44066.
5. И. И. Стойков и др. *Ж. Орг. Х.*, 2024, **60**, 170.
6. С. М. Медведева, Х. С. Шихалиев *Ж. Орг. Х.*, 2018, **54**, 161.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2023-2025 годы, проект № FZGU-2023-0009.

Rh(II)-КАТАЛИЗИРУЕМЫЕ РЕАКЦИИ ИЗОКСАЗОЛ- И 2H-АЗИРИН-1,2,3-ТРИАЗОЛЬНЫХ ДИАД В СИНТЕЗЕ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Титов Г.Д., Мошненко Н.А., Ростовский Н.В.

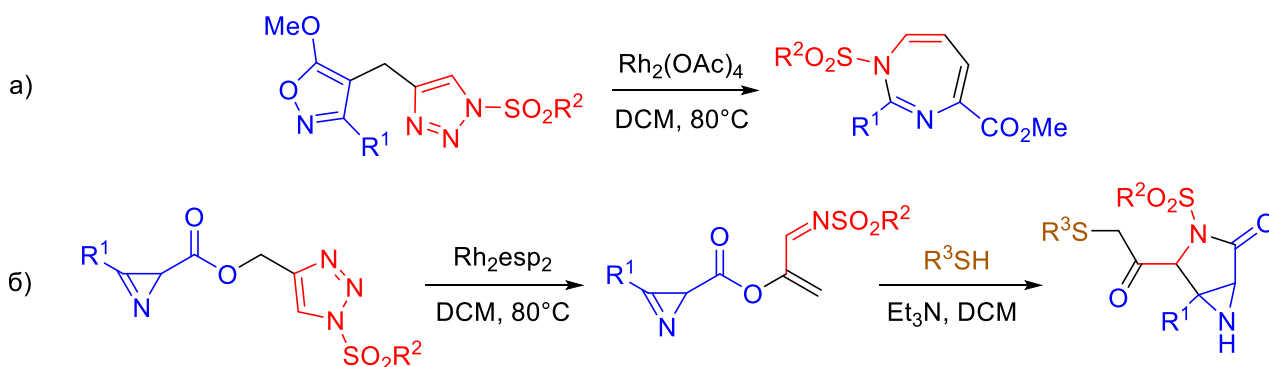
Санкт-Петербургский государственный университет,
Институт химии, Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: gdtitov@mail.ru

Согласно литературным данным, не менее 60% представленных на рынке лекарств на основе малых молекул имеют в своём составе хотя бы один азотсодержащий гетероциклический фрагмент, что подчёркивает актуальность новых методов синтеза таких соединений [1].

Одними из часто используемых субстратов в создании и модификации карбо- и гетероциклических структур медицинской направленности являются диазосоединения и родственные им 1-сульфонил-1,2,3-триазолы [2]. С момента открытия Rh(II)-катализируемых реакций данных триазолов в научном сообществе было проведено большое количество плодотворных исследований, посвящённых получению распространённых ароматических пяти- и шестичленных азагетероциклов (пирролов, имидазолов, пиридинов), в то время как синтезы более сложных и редких азотсодержащих гетероциклических структур представлены в литературе в гораздо меньшей степени [3].

Данная работа посвящена изучению Rh(II)-катализируемых реакций изоксазол- и 2H-азирин-1,2,3-триазольных диад, являющихся основой новых методов синтеза труднодоступных другими способами азотсодержащих гетероциклов: 1,3-дiazепинов (а) [4] и производных 3,6-дiazабицикло[3.1.0]гексана (б). Ключевой задачей исследования является реализация разрабатываемых методов в одnoreакторном формате, что в совокупности с операционной простотой, позволяет рассматривать их как потенциальные платформы для синтеза и выявления новых биологически активных соединений.

Детали работы будут освещены в рамках доклада.



Литература

1. C. M. Marshall, J. G. Federice, C. N. Bell, P. B. Cox, J. T. Njardarson *J. Med. Chem.*, 2024, **67**, 11622.
2. T. Horneff, S. Chuprakov, N. Chernyak, V. Gevorgyan, V. V. Fokin *J. Am. Chem. Soc.*, 2008, **130**, 14972.
3. M. Akter, K. Rupa, P. Anbarasan *Chem. Rev.*, 2022, **122**, 13108.
4. G. D. Titov, A. S. Bunev, S. V. Urusova, M. S. Novikov, A. F. Khlebnikov, N. V. Rostovskii *Org. Lett.*, 2024, **26**, 7828.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-73-10184).

СИНТЕЗ 3,3-БИСГИДРОКСИМЕТИЛЬНЫХ СТЕРИЧЕСКИ ЗАТРУДНЕННЫХ НИТРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ РЯДА ПИРРОЛИДИНА И ИХ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ЭПР

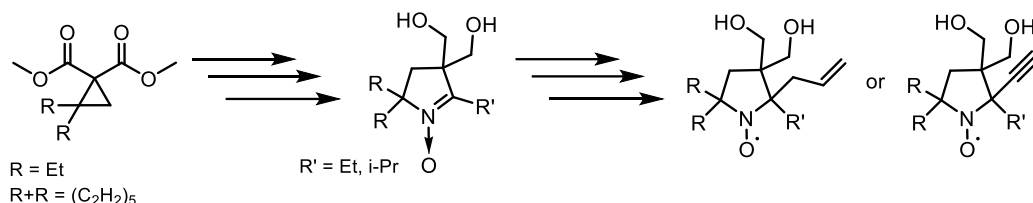
**Трахинина С.Ю., Таратайко А.И., Асанбаева Н.Б., Кузнецов Д.А.,
Багрянская Е.Г., Кирилюк И.А.**

*Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова СО РАН
Новосибирск, Россия.*

e-mail: s.trakhinina@gmail.com

Нитроксиды пирролидинового ряда с четырьмя объемными алкильными заместителями вблизи радикального центра демонстрируют высокую устойчивость к биовосстановлению [1]. По этой причине их использование в качестве спиновых меток и зондов для внутриклеточных и *in vivo* исследований ЭПР и ЯМР вызывает большой интерес [2]. Актуальной задачей является разработка методов получения радикалов данного класса.

В данной работе нами была предложена простая схема синтеза 3,3-бис-гидроксиметильных стерически затрудненных нитроксидов ряда пирролидина с использованием формальной реакции [3 + 2] циклоприсоединения донорно-акцепторных циклопропанов с алкилнитрилами [3]. Такой подход к синтезу позволяет получать ахиральные нитроксиды, что труднодоступно для других методов синтеза.



Методом ЭПР спектроскопии было проведено исследование новых нитроксильных радикалов: определены величины констант сверхтонкого взаимодействия, измерены константы скорости восстановления аскорбатом и времена спин-спиновой и спин-решеточной релаксации. Новые нитроксиды демонстрируют редкое сочетание оптимальных параметров спиновой релаксации и высокой устойчивости к восстановлению, что делает их привлекательными предшественниками для спиновых меток и зондов.

Литература

1. Jagtap A.P., et al. // Free Radic. Res., 2015, 49, 78–85.
2. Pierro A., Drescher M. // ChemCommun, 2023, 59, 1274–1284.
3. Yu M., Pagenkopf B.L. // J. Am. Chem. Soc., 2003, 125, 8122–8123

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-13-00327).

ГЕТЕРОГЕННЫЙ ФОТОКАТАЛИЗ В С-Н ФУНКЦИОНИЗАЦИЯХ АЗИНОВ С 2-ФЕНИЛИМИДАЗО[1,2-*a*]ПИРИДИНАМИ

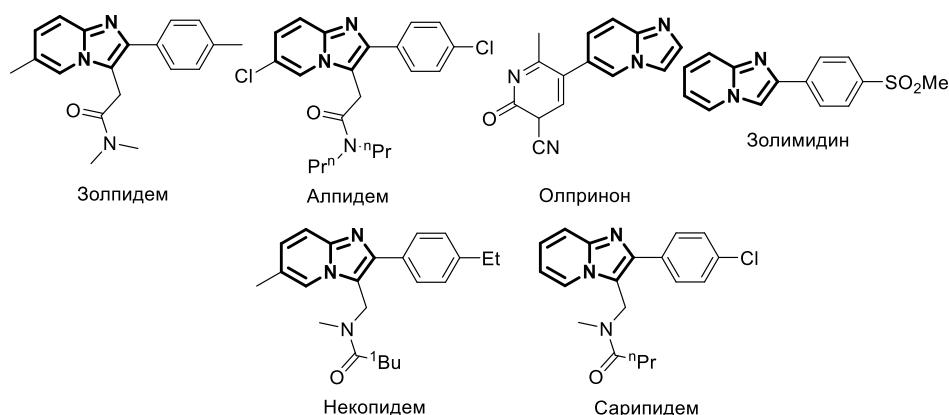
Тресцова М.А.^{а,б}, Андреева Д.А.^а, Утепова И.А.^{а,б}, Чупахин О.Н.^{а,б}

^аУральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия.

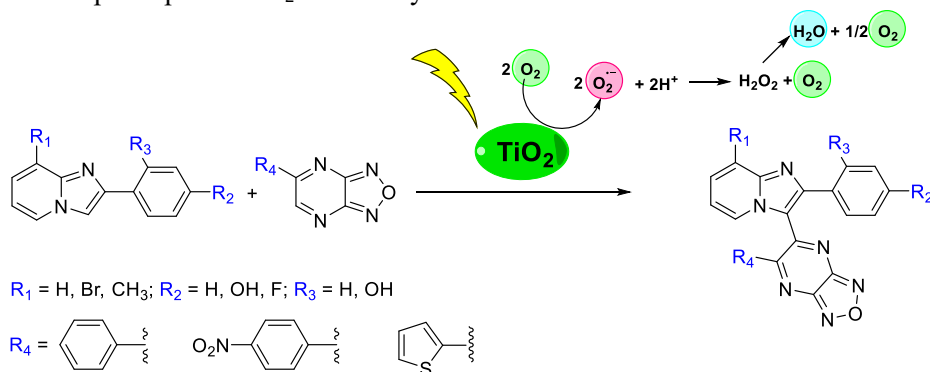
e-mail: maria.trestcova@urful.ru

^бИнститут органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, Екатеринбург, Россия.

Имидазопиридин является важным азотсодержащим гетероциклом, который содержится в составе многих биологически активных и природных соединений. Существует несколько препаратов, содержащих имидазо[1,2-*a*]пиридиновый фрагмент, такие как золпидем (лечение бессонницы), алпидем (седативное средство), олпринон (лечение острой сердечной недостаточности), золимидин (лечение язвенной болезни), некопидем и сарипидем (транквилизаторы), широко применяющихся в медицинской практике.



В настоящей работе были проведены реакции С-Н/С-Н сочетания [1,2,5]оксадиазоло[3,4-*b*]пиазинов с 2-фенилимидазо[1,2-*a*]пиридинами. Для осуществления данных превращений была использована окислительная система O₂ воздуха / наноразмерный TiO₂/ УФ облучение.



В результате проведения реакций были получены азагетероциклические производные имидазо[1,2-*a*]пиридинов, перспективные для исследования биологической активности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00298-П).

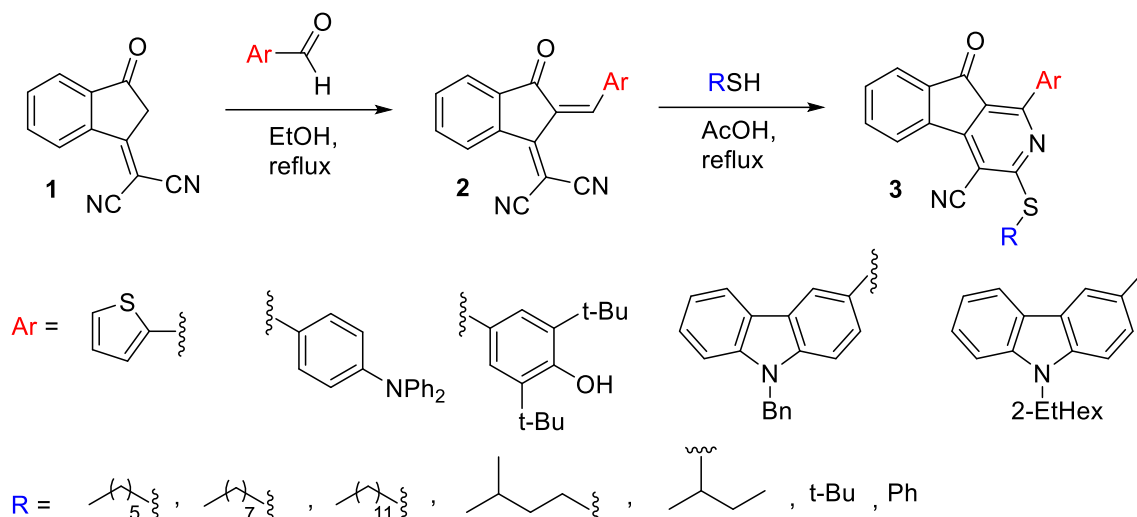
ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫЕ ХРОМОФОРЫ НА ОСНОВЕ 2-АЗАФЛУОРЕНОНА: ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ НА ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

Усова С.Д., Князева Е.А., Ракитин О.А.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47
e-mail: sonyss112@mail.ru

В течение последних десятилетий усилия многих научных групп по всему миру было направлено на разработку донорно-акцепторных хромофоров, поскольку эти структуры нашли применение в многочисленных областях исследований: нелинейной оптики (NLO), органической фотовольтаики (OPV), фотоактивных веществ для медицинской химии, фотоинициаторов полимеризации и других практических приложений [1]. Обычно такие хромофоры состоят из донорного фрагмента, соединенного с электрон-дефицитным фрагментом непосредственно или посредством сопряженного или несопряженного спейсера.

Пути направленной функционализации самого 2-азафлуоренона ограничены и наиболее перспективной стратегией введения широкого круга заместителей является использование последовательности реакций конденсации с получением аддукта **2**, который затем в реакции с N-нуклеофилами вследствие каскадного процесса превращается в продукт, подобный соединению **3** [2]. При этом ранее не была изучена сборка подобного каркаса с вовлечением других нуклеофильных частиц, например S-нуклеофилов.



С целью изучения границ применимости этого превращения нами была исследована реакция с алифатическими и ароматическими тиолами с целью получения S-замещенных 2-азафлуоренонов и расширения библиотеки хромофорных структур на основе этого каркаса. Показано, что полученные соединения имеют повышенные значения экстинкции при поглощении в области 250 нм и могут быть использованы в качестве концевых групп в тройных солнечных элементах.

Литература

1. C. Pigot, G. Noirbent, S. Peralta, S. Duval, T.-T. Bui, P.-H. Aubert, F. Dumur *Dyes and Pigments*, 2020, **175**, 108182.
2. M. Gao, H. Su, Y. Lin, X. Ling, S. Li, A. Qin, B. Z. Tang *Chemical Science*, 2017, **8**, 1763.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00026).

СИНТЕЗ ДИАЗАТРИПИРРИНОВ, СУБФТАЛОЦИАНИНОВ И ИХ АЗА-АНАЛОГОВ

Фазлыева А.М., Скворцов И.А., Стужин П.А.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия.

e-mail: alinamf@mail.ru

Среди сокращенных трипиррольных аналогов фталоцианинов известны субфталоцианины, субпорфирины и субпорфирины. Недавно впервые был описан синтез свободного основания субпорфирина[1]. Среди аналогов трипиррола циклического и нециклического строения, содержащих один или два N-мостика, известны олигоизоиндолы[2], диазатрипиррин[3] и суббилиазин[4]. В настоящее время трипиррины различного строения представляют практический интерес, поскольку могут использоваться как селективные анионные рецепторы[5].

В данной работе нами было установлено, что аналоги субфталоцианина бора(III) с электроноакцепторными фрагментами в присутствии воды подвергаются гидролитическому расщеплению макроцикла и деборированию. В результате образуются нециклические аза-мостиковые трис-изоиндолы, которые являются конденсированными производными 5,10-диазатрипирринов (DATRIPY). Эта реакция возможна для пергалогенированных или/и аза-замещенных аналогов субфталоцианина бора(III) и происходит особенно легко для гексахлорированного хлорида трипиразинсубпорфизинатобора(III), давая соответствующий 14-амино-5,10-диазатрипиррин-1-он [DATRIPY-1a] (Схема 1), содержащий конденсированные фрагменты дихлорпиразина в каждом пиррольном фрагменте. Рентгеноструктурный анализ показал, что DATRIPY-1a имеет S-образную конформацию, которая стабилизируется двумя внутримолекулярными водородными связями между пиррольными группами NH и азотами пирроленина и пиразина. Кроме того, нами также были проанализированы особенности влияния различных растворителей на конечные продукты реакции деборирования, в том числе в спиртах.

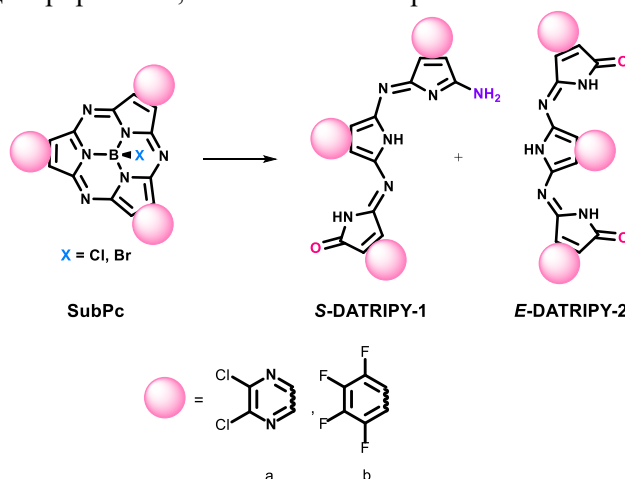


Схема 3. Синтез диазатрипирринов.

Литература

1. L. Liu, J. Kim, L. Xu *Angewandte Chem.*, 2022, **134**(50), e202214342.
2. Y. Zhang, et. al. *Org. Chem. Fron.*, 2017, **4**(12), 2364-2369.
3. B. Marx, V. N. Nemykin *J. Porphyr. Phthalocyanines*, 2023, **27**(01n04), 363-372.
4. B. R. Schrage, V. N. Nemykin *Org. Let.*, 2021, **23**(3), 1076-1080.
5. Q. Wang, Y. Xie, Y. Ding *Chem. Com.*, 2010, **46**(21), 3669-3671.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-73-20126).

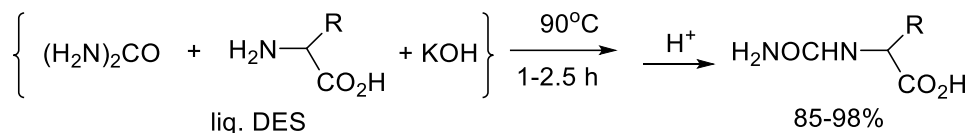
НОВЫЕ ГЛУБОКИЕ ЭВТЕКТИЧЕСКИЕ РАСТВОРИТЕЛИ НА ОСНОВЕ МОЧЕВИН И АМИНОКИСЛОТ В ЭФФЕКТИВНЫХ СИНТЕЗАХ ВАЖНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Филимонов В.Д., Ховренко Е.В., Шагжаева Д.Д., Бондарев А.А.

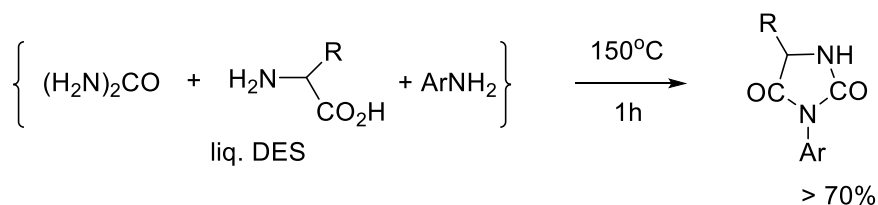
*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
НОЦ им. Н.М.Кижнера, Томск, Россия*

Мы нашли, что мочевина и некоторые ее производные образуют при некоторых соотношениях жидкие при комнатной температуре и ранее неописанные эвтектические смеси, подобные deep eutectic solvents (DES), с КОН или DBU и L-аминокислотами (AA): Urea-KOH, Urea-KOH-AA, Urea-AA, Urea-DBU. Важно отметить, что мочевина образует DESs только с DBU и КОН, но не с LiOH, NaOH и другими щелочами. Исследованы физико-химические свойства и строение данных DESs методами ЯМР и ИК с привлечением методов квантовой химии и молекулярной динамики.

Наиболее интересно то, что в данных DESs мочевина и аминокислоты обладают повышенной реакционной способностью и могут взаимно активировать друг друга. Так, нагревание DESs Urea-KOH-AA приводит к образованию чистых карбамоиламинокислот за очень короткое время, с высокими выходами и с сохранением конфигурации исходных AA [1]



В отсутствие КОН нагревание DESs Urea-AA также дает карбамоиламинокислоты, но медленней и с более низкими выходами. Однако трехкомпонентная реакция Urea-AA с анилинами быстро приводит к образованию гидантоинов



Ранее подобную реакцию в препаративном масштабе в растворителях проводили с использованием арилизоцианатов и *трет*-бутиловых эфиров аминокислот, т.е. дешевая мочевина может с успехом заменять изоцианаты, и отпадает необходимость получения эфиров AA.

Описанные выше превращения протекают с распадом мочевины, однако повышенная активность мочевины и тиомочевины в DESs с КОН проявляется и в реакциях с сохранением скелета мочевины. Так, они почти мгновенно реагируют с бензилами, образуя с высокими выходами фенитоины [2].

Реакции описанных DESs в сравнении с классическими вариантами тех же реакций в растворителях показывают намного большую скорость и селективность. Обсуждаются причины столь необычных и полезных для практических целей свойств данных DESs.

Литература

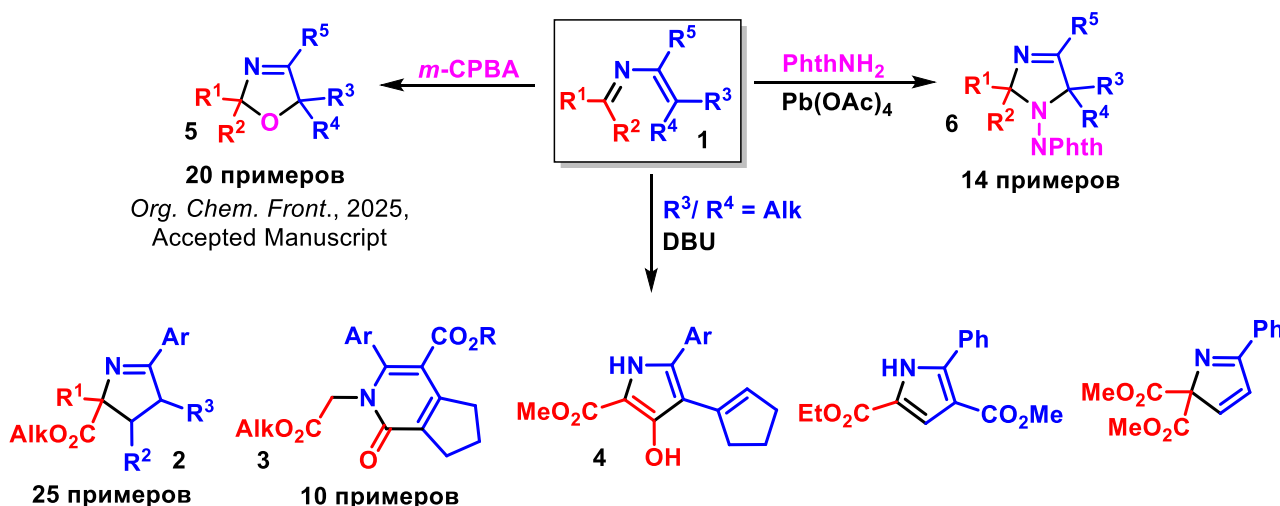
1. Е.В. Ховренко, В.С. Сенник, В.Д. Филимонов, В.В. Штрыкова, В.Ю. Баула. Способ получения N-карбамоил-L-глутаминовой кислоты. *Пат. РФ* № 2841838, 2025.
2. E.V.Khovrenko, V.Yu. Baula, V.V. Shtrykova, V.Yu. Kuksenok, V.D. Filimonov, *Chem. Het. Compounds*. 2024, **60**, 103.

НОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ 2-АЗАБУТА-1,3-ДИЕНОВ В ПРОИЗВОДНЫЕ ПИРРОЛА, ПИРИДОНА, ОКСАЗОЛИНА И ИМИДАЗОЛИНА

**Филиппов И.П., Ростовский Н.В., Захаров Т.Н., Гришин А.В.,
Новиков М.С., Хлебников А.Ф.**

Санкт-Петербургский государственный университет,
Институт химии, Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: i.filippov@spbu.ru

2-Азабута-1,3-диены **1** являются уникальными субстратами для получения широкого круга гетероциклических соединений. Удобный подход к синтезу 2-азабутадиенов заключается в металл-катализируемой реакции диазосоединений с 2*H*-азиринами [1], однако синтез пятичленных неароматических гетероциклов из 2-азабута-1,3-диенов **1** до недавнего времени практически не был представлен среди литературных данных. Нами были обнаружены новые превращения 2-азабутадиенов в пяти- и шестичленные гетероциклические соединения. Показано, что 4-алкил-2-азабутадиены в присутствии основания ДБУ вступают в циклизацию с образованием 1-пирролинов **2** [2], тогда как в аналогичной реакции 4-циклопентил-2-азабутадиенов продуктами являются производные 1-оксо-1*H*-циклопента[с]пиридина **3** и 3-гидрокси-пиррола **4** [3]. Обнаружены реакции (4+1)-аннелирования 2-азабутадиенов с *m*-хлорпероксибензойной кислотой [4] и *N*-аминофталимидом, продемонстрирован их синтетический потенциал для получения производных 3-оксазолина **5** и 3-имидазолина **6** соответственно. На основе проведённых квантово-химических расчётов и контрольных экспериментов предложены механизмы обнаруженных превращений, которые были доведены до синтетически значимых методов.



J. Org. Chem. 2022, **87**, 8835; *J. Org. Chem.* 2024, **89**, 15404

Литература

1. N.V. Rostovskii, M.S. Novikov, A.F. Khlebnikov *Organics*, 2021, **2**, 313.
2. I.P. Filippov, M.S. Novikov, A.F. Khlebnikov, N.V. Rostovskii *J. Org. Chem.*, 2022, **87**, 8835.
3. I.P. Filippov, T.N. Zakharov, A.V. Grishin, A.F. Khlebnikov, M.S. Novikov, N.V. Rostovskii *J. Org. Chem.*, 2024, **89**, 15404.
4. I.P. Filippov, M.S. Novikov, Rostovskii N.V. *Org. Chem. Front.*, 2025, Accepted Manuscript.

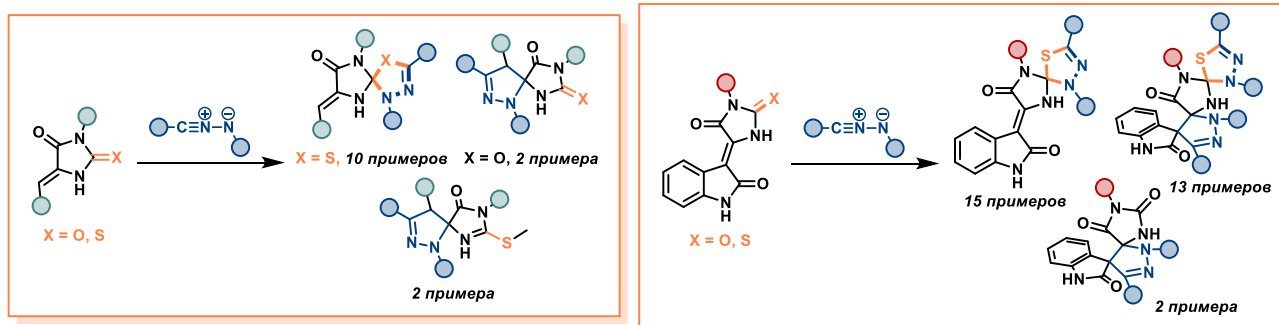
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (гранты 19-73-10090, 22-73-10184).

РЕАКЦИИ НИТРИЛИМИНОВ С ПРОИЗВОДНЫМИ ГИДАНТОИНОВ И ТИОГИДАНТОИНОВ

Филькина М.Е., Белоглазкина Е.К., Кукушкин М.Е.

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

Пиразолы и пиразолины представляют собой важные гетероциклические фрагменты, широко распространённые среди биологически активных соединений [1]. Надёжным и эффективным методом их получения служит реакция 1,3-дипольного циклоприсоединения нитрилиминов к разнообразным диполярофилам, содержащим кратные углерод–углерод и углерод–гетероатом. Кроме того, для нитрилиминов известна высокая склонность к присоединению по кратным связям сера–углерод [2]. Применение нитрилиминов также позволяет получать молекулы, содержащие спиросочленённые гетероциклические фрагменты, что повышает конформационную жёсткость молекул и способствует увеличению их биологической активности [3].



В настоящей работе исследована реакционная способность нитрилиминов в реакциях с гидантоинами и тиогидантоинами, содержащими экзоциклические связи C=C и C=S. Показано, что природа заместителей в структуре нитрилимина существенно влияет на направление и результат реакций циклоприсоединения. Установлены закономерности, касающиеся хемоселективности 1,3-дипольного циклоприсоединения к указанным субстратам, а также влияние степени замещённости двойной связи в диполярофиле на его реакционную способность. Разработаны подходы к хемо-, регио- и диастереоселективному синтезу ранее не описанных в литературе спиропроизводных, содержащих тиазолиновые, пиразолиновые и гидантоиновые фрагменты.

Литература

1. Jamieson C., Livingstone K. The nitrile imine 1, 3-dipole //Properties, Reactivity and Applications; Springer Nature Switzerland AG: Cham, Switzerland. – 2020.
2. Dalloul H. M. M. Synthesis of spiroheterocycles containing thiadiazole thiadiazine and triazine moieties from nitrilimines //Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements. – 2011. – Т. 186. – №. 9. – С. 1876-1884.
3. Bora D., Kaushal A., Shankaraiah N. Anticancer potential of spirocompounds in medicinal chemistry: A pentennial expedition //European Journal of Medicinal Chemistry. – 2021. – Т. 215. – С. 113263.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ грант 24-13-00004.

СИНТЕЗ N⁹-ЗАМЕЩЕННЫХ ГУАНИДИНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АДЕНИНА И ИХ ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ В МЕДИЦИНЕ

Финагеева М.О.

*Волгоградский государственный медицинский университет,
кафедра фармацевтической и токсикологической химии, фармакогнозии и ботаники,
Волгоград, Россия.
e-mail: mari.tuzhikova@inbox.ru*

Актуальность: Исследование и структурная модификация аденина и его производных для получения биологически активных веществ – актуальное на сегодняшний день направление в области химии гетероциклических соединений. Обзор литературных данных и опыт предыдущих поколений показал, что новые производные аденина, разрабатываемые на базе Волгоградского государственного медицинского университета, обладают высоким потенциалом к наличию биологического действия. Так в университете был сделан акцент на поиск перспективных молекул в относительно малоизученной группе лекарственных препаратов – цитопротекторов – ингибиторов Na⁺/H⁺ обменника первого типа (NHE-1). Соединения с такой фармакологической активностью защищают в том числе клетки миокарда от ишемического и реперфузионного повреждения. Ранее была отмечена корреляция между фармакологической активностью и химической структурой и выявлено, что большая часть известных ингибиторов NHE-1 содержит фрагмент гуанидина в своей структуре. В связи с этим был синтезирован ряд соединений – гуанидиновых производных аденина.

Целью исследований являлось разработка и усовершенствование синтеза перспективных фармакологически активных молекул – гуанидиновых производных аденина.

При проведении исследований решали ряд задач: проверка эффективности синтеза конечных соединений с использованием разработанной методики и полученных сложноэфирных производных; отработка процесса очистки полученных соединений; определение физических свойств и спектральное подтверждение структуры продуктов и оценка их фармакологической активности

Основываясь на литературных данных, была разработана структура N⁹-замещенной молекулы аденина с предполагаемой фармакологической активностью.

Для проведения исследований использовали ранее наработанные сложноэфирные производные аденина, калия гидроксид ч.д.а. (компания Aldosa), гуанидина хлорид 99,5% (компания Panreac), аминугуанидина бикарбонат 98,5% (компания Acros organic).

Структуру полученных соединений подтверждали ЯМР – спектрально («Bruker Avance 600») из растворов ДМСО-d₆, внутренний стандарт – тетраметилсилан. Фиксацию интервала плавления соединений проводили капиллярным методом (Mel-temp 3.0.)

Метод получения N⁹-замещенных гуанидиновых производных аденина: навески этиладенинпропаноата или этиладенинацетата и гуанидина гидрохлорида растворяли в этиловом спирте. В горячую реакционную смесь добавили гидроксид калия, кипятили заданное время и фильтровали горячим. После остывания наблюдалось выпадение кристаллического осадка – целевого продукта. Фильтрат выдерживали при температуре 0-5°C в течение 24 часов и снова фильтровали, сушили и получили конечные линейные продукты аминирования в виде белых кристаллов с выходом 80-90%, соответственно.

Циклические продукты получали аналогично линейным с выходом 82-92%, но при использовании аминугуанидина гидрокарбоната.

Выводы: В результате проведенных работ показано, что разработанный способ позволяет получить N⁹-гуанидиновые производные аденина с выходом целевых продуктов до 92,0 %.

Исследования проводили в Научном центре инновационных лекарственных средств ВолгГМУ.

СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ СЕРОСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ О-ГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ОСНОВЕ 2(5H)-ФУРАНОНА И ТЕРПЕНОВЫХ СПИРТОВ

**Хабибрахманова А.М.^а, Раббаниева Э.С.^а, Тризна Е.Ю.^б, Колышкина С.В.^б,
Латыпова Л.З.^а, Каюмов А.Р.^б, Курбангалиева А.Р.^а**

^аКазанский федеральный университет,

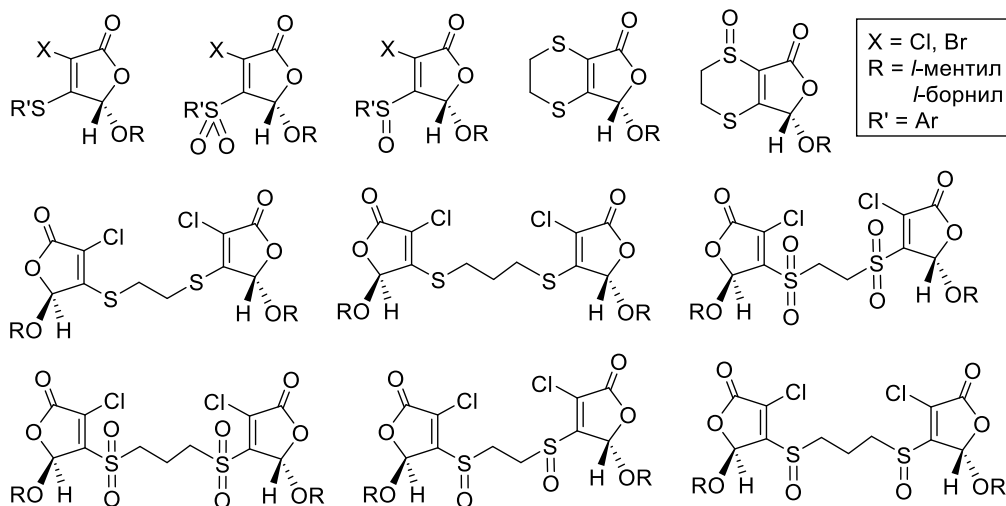
Химический институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия.

^бКазанский федеральный университет, Институт фундаментальной медицины и биологии,
Казань, Россия.

e-mail: AMHabibrahmanova@kpfu.ru

2(5H)-Фураноны относятся к пятичленным кислородсодержащим гетероциклам, имеющих важное фармакологическое значение. Фураноновый цикл встречается в структуре антимикробных, противовоспалительных, противовирусных и противоопухолевых веществ, а также инсектицидов и фунгицидов. Доступность и наличие в молекуле нескольких реакционных центров делают данные гетероциклы универсальными строительными блоками в современном органическом синтезе и молекулярном дизайне лекарств.

В данной работе предложены препаративные методы синтеза серосодержащих соединений различного строения на основе 2(5H)-фуранонов, монотерпеновых спиртов, ароматических тиолов и алифатических дитиолов. В реакциях тиолирования 5-ментилокси- и 5-борнилокси-2(5H)-фуранонов в условиях основного катализа с хорошими выходами получены 4-арилтиоэфиры, бис-тиоэфиры и сернистые бициклы ряда [1,4]дитиино[2,3-с]фуран-5(7H)-она. Разработаны методы селективного окисления тиопроизводных фуранона разного структурного типа до моно- и дисульфоксидов, моно- и дисульфонов, основанные на использовании м-хлорнадбензойной кислоты или пероксида водорода в уксусной кислоте. Целевые продукты выделены в стереоизомерно чистом виде и охарактеризованы спектральными методами и методом рентгеноструктурного анализа.



В ряду синтезированных соединений обнаружены вещества с выраженной антибактериальной и противогрибковой активностью. Выявлен эффект синергизма некоторых гетероциклов при их комбинировании с антибиотиками аминогликозидного ряда, противогрибковыми средствами и бензалкония хлоридом в отношении микроорганизмов в составе как моно-, так и смешанных культур.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 23-73-10182).

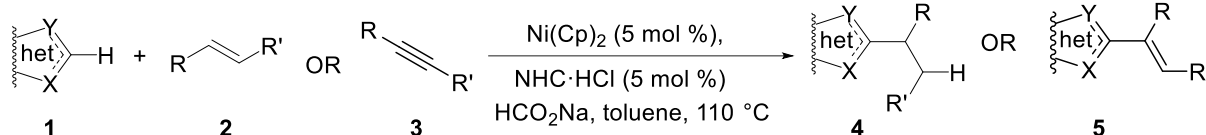
Ni/NHC КОМПЛЕКСЫ В КАТАЛИЗЕ РЕАКЦИЙ АЛКИЛИРОВАНИЯ И АЛКЕНИЛИРОВАНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Хазипов О.В.,^a Хазипова О.В.,^a Шепеленко К.Е.,^a Чернышев В.М.,^a Анаников В.П.^{a,b}

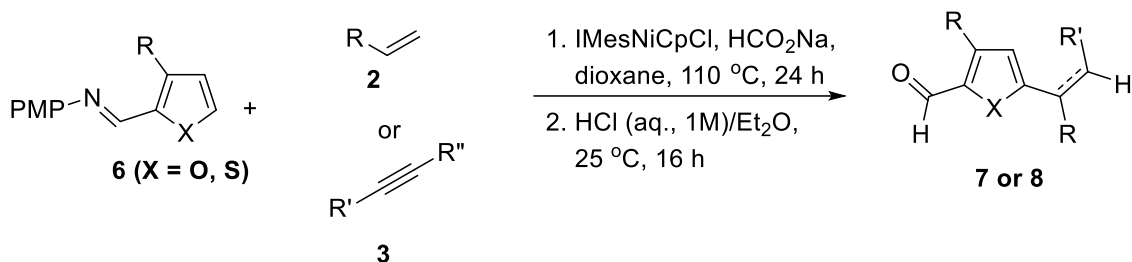
^aЮжно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, Новочеркасск, 346428,

^bИнститут Органической Химии им.Н.Д.Зелинского РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 47
e-mail: hazipov@mail.ru

Ранее нами была разработана простая каталитическая система алкилирования и алкенилирования гетероароматических соединений алкенами и внутренними алкинами [1].



Установлено, что при проведении реакции алкилирования и алкенилирования фуран- и теофен-2-карбоксальдегидов алкенами и алкинами вместо необходимых продуктов C(5)-H алкилирования или алкенилирования наблюдается образование продуктов бензоиновой конденсации. Для предотвращения протекания побочной бензоиновой конденсации, было предложено защитить формильную группу. Использование защитной группы N-PMP (*p*-OMePh) позволило эффективно провести Ni/NHC катализируемую реакцию алкилирования и алкенилирования разнообразных фуран- и теофен-2-карбоксальдегидов.



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 (грант 24-23-00424).

ПРЯМОЕ C(H)-N(H) СОЧЕТАНИЕ АЗИНОВ И ИХ N-ОКСИДОВ С АМИНАМИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СОЕДИНЕНИЙ Ag(I)

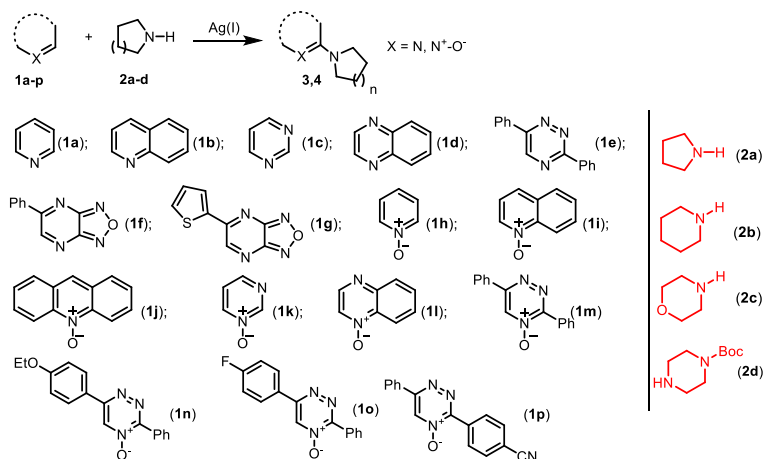
Черенева В.Д.^а, Казакова Е.Д.^{а,б}, Утепова И.А.^{а,б}, Чупахин О.Н.^{а,б}

^а Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, химико-технологический институт, г. Екатеринбург, Россия

^б Институт органического синтеза УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
e-mail: i.a.utepova@urfu.ru

Разработка селективных и эффективных методов формирования C–N имеет важное значение для современной органической химии. Особенно важным это направление становится при модификации гетероциклических соединений, поскольку введение аминогрупп способно существенно изменить их химические и биологические свойства. Кроме этого, этот подход используется при создании новых материалов, биологически активных соединений. Традиционные методы алкиламинирования гетероаренов, основанные на нуклеофильном замещении галогенпроизводных или металлокатализируемых кросс-сочетаниях, как правило, требуют предварительной активации субстратов и нередко сопровождаются образованием значительных количеств побочных продуктов. В связи с этим актуальной задачей остается поиск более эффективных и экологически безопасных методов C–N функционализации гетероциклов.

В ходе исследований был предложен метод прямого окислительного алкиламинирования азинов и их N-оксидов в присутствии соединений Ag(I). Реакция осуществлялась в мягких условиях с выходом алкиламинопроизводных азинов до 99%.



Строение полученных соединений было доказано при помощи данных ЯМР ¹H, ¹³C спектроскопии, масс-спектрометрии и данных элементного анализа, рентгеноструктурного анализа.

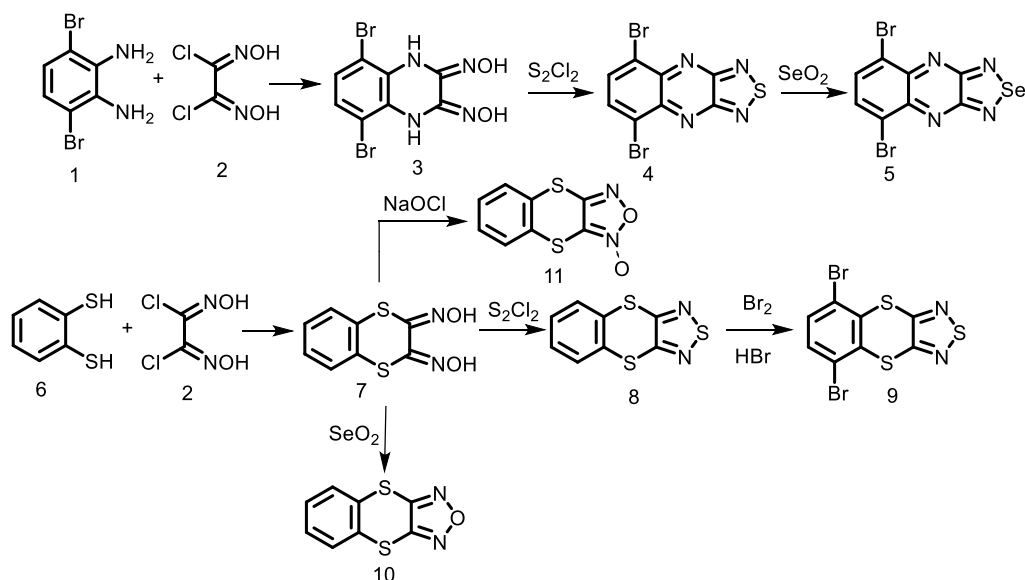
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00298-П).

СИНТЕЗ НОВЫХ АКЦЕПТОРНЫХ КОМПОНЕНТОВ НА ОСНОВЕ КОНДЕНСИРОВАННЫХ 1,2,5-ХАЛЬКОГЕНАДИАЗОЛОВ КАК ПРЕДШЕСТВЕННИКОВ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Чечулина А.С., Константинова Л.С., Князева Е.А., Ракитин О.А.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 47
e-mail: aaalexche@gmail.com

Среди огромного количества органических красителей, которые используются для создания различных оптовольтайческих приборов, одной из наиболее изучаемых групп являются структуры на основе бензо[с][1,2,5]тиадиазола. Многочисленные устройства, сконструированные с использованием его производных, показали хорошие результаты, а функционализация бензо[с][1,2,5]тиадиазола с целью поиска новых структур с полезными свойствами еще вызывает интерес исследователей. Однако несмотря на это, данное направление постепенно исчерпывают возможности дальнейшего развития. В то же время квантово-механические расчеты показывают, что значительный интерес могут представлять более электронодефицитные структуры [1]. Поэтому с целью расширения библиотеки электронодефицитных гетероциклов, нами был разработан подход к новым акцепторным блокам **4,5,9,10**.



Полученные новые электронодефицитные соединения **4,5,9,10** могут служить ключевыми исходными субстратами для синтеза новых высокоэффективных компонентов для оптовольтайческих устройств, таких как солнечные элементы [2] и органические светодиоды. С целью изучения возможности функционализации данных гетероциклов были изучены химические превращения данных соединений.

Литература

1. M. Zhang, X. Guo, W. Ma, H. Ade, J. Hou, *Adv. Mater.* 2015, **27**, 4655
2. Z. Zhang, T. Chen, X. Dong, H. Li, T. Duan, E. Knyazeva, A. Chechulina, O. Rakitin, B. Kan, X. Wan, Y. Chen, *J. Mater. Chem. C* 2025, Advance Article

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 24-43-00022).

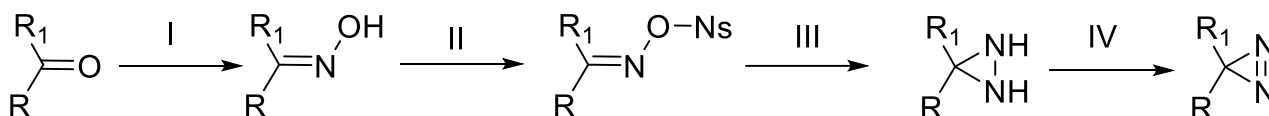
ДИАЗИРИНЫ В ФОТО-AКТИВИРУЕМЫХ РЕАКЦИЯХ ХН ВНЕДРЕНИЯ

Чупахин Е.Г., Буров Р., Мальфанов И.Л., Лагунова О., Мершиев И.Г.

Балтийский федеральный университет им. И. Канта.

e-mail: echupakhin@kantiana.ru

Наша программа исследований ингибиторов тау-киназ, была направлена на развитие новых подходов увеличения химического разнообразия заместителей в гетероциклических системах пиримидинов, триазинов и имидазолов. Наш подход заключался в введении разнообразных заместителей у боковых amino- и гидроксигрупп интересующих нас гетероциклов. Мы обратили внимание на возможности использования стратегии ХН-внедрения с участием карбеноидов генерируемых из диазиринов. Диазирины хорошо известные гетероциклические системы используемые в органическом синтезе а также в получении биокньюгатов [1,2].



R, R1 - H, Alk, Aryl, HetAryl

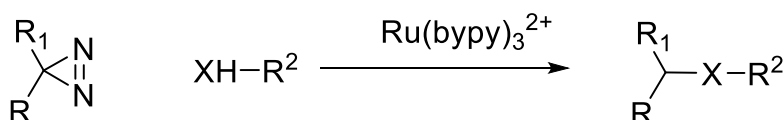


Схема 1: I: (Et)₃N, нагревание, перемешивание, порционное добавление 1,5 экв NH₂OH·HCl, 5 часов; II: (Et)₃N, 1,2 экв NsCl, комнатная температура, перемешивание, 5 дней; III: 4 экв газообразного аммиака, ледяная баня, перемешивание, 1 день; IV: MeOH, 1,5 экв (Et)₃N, 1,2 экв кристаллического йода, ледяная баня, перемешивание, 1 день;

Нами предложен путь получения диазиринов исходя их нозилатов оксимов, которые превращают в соответствующие диазирины, окислением последних могут быть получены соответствующие диазирины

В дальнейшем нами исследовалась реакционная способность полученных диазиринов в реакциях ХН – внедрении при катализе комплексами рутения и облучением ультрафиолетом с длиной волны 380 и 465 нм

Литература

- 1 Tachrim, Z. P.; Wang, L.; Murai, Y.; Hashimoto, M. *Molecules* **2021**, 26.
- 2 Murai, Y.; Hashimoto, M. *Molecules* **2023**, 28.

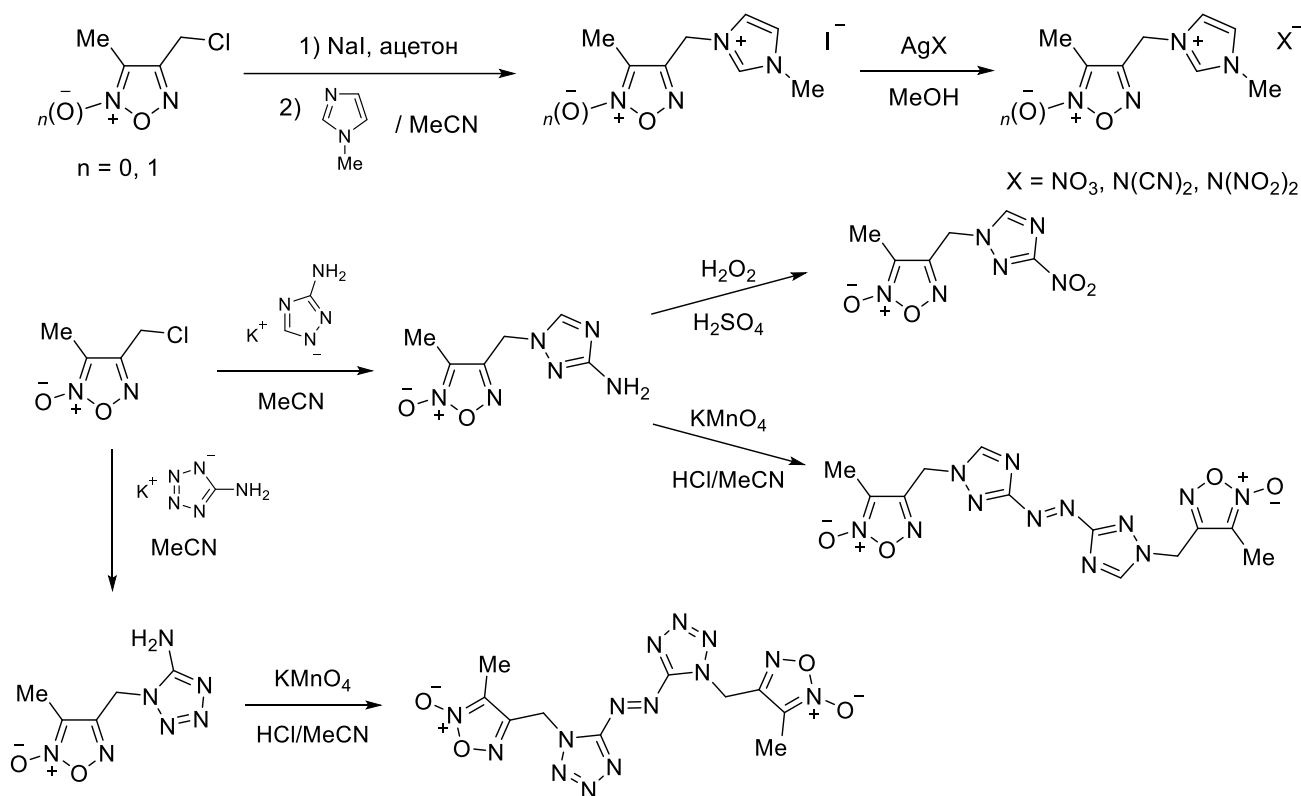
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00603).

НОВЫЕ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ АНСАМБЛИ НА ОСНОВЕ МЕТИЛ-1,2,5-ОКСАДИАЗОЛА

Шаферов А.В., Ферштат Л.Л.

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

Разработка новых высокоэнтальпийных энергоёмких материалов нового поколения является актуальной и перспективной темой исследований последних лет. Одной из стратегий достижения оптимального баланса между энергетическими свойствами, термической стабильностью и эксплуатационными характеристиками является комбинация в структуре соединения нескольких различных азотсодержащих гетероциклов с explosоформными заместителями, в частности, объединение фуоксанового цикла с иными азолами через азомостик [1]. В представленной работе последовательная модификация 3-хлорметил-4-метилфуоксана позволяет получить серию новых производных 3-метилфуоксана, сочленённых с имидазольным, триазольным или тетразольным циклом через метиленовый линкер [2, 3] и содержащих explosоформные группы в своём составе. Полученные соединения обладают высокой термической стабильностью.



Литература

1. Larin A.A., Shaferov A.V., Kulikov A.S., Pivkina A.N., Monogarov K.A., Dmitrienko A.O., Ananyev I.V., Khakimov D.V., Fershtat L.L., Makhova N.N., *Chem. Eur. J.* 2021, **27**, 14628.
2. Shaferov A.V., Arakelov S.T., Teslenko F.E., Pivkina A.N., Muravyev N.V., Fershtat L.L., *Chem. Eur. J.* 2023, **29**, e202300948.
3. Shaferov A.V., Ananyev I.V., Monogarov K.A., Fomenkov I.V., Pivkina A.N., Fershtat L.L., *ChemPlusChem* 2024, **89**, e202400496.

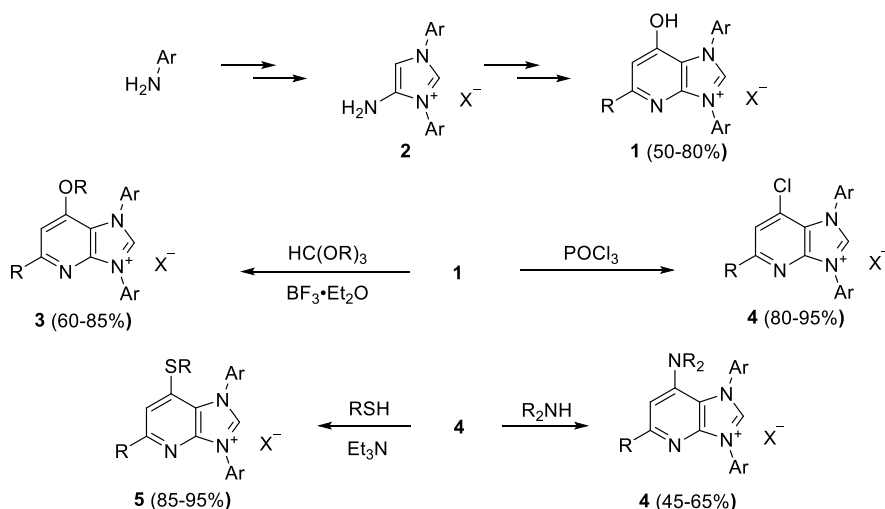
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-73-20217).

ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫЕ СОЛИ ИМИДАЗО[4,5-*b*]ПИРИДИНИЯШевченко М.А.^а, Шепеленко К.Е.^{а,б}, Малахов А.Ю.^а, Чернышев В.М.^{а,б}^аЮРГПУ (НПИ), 346428 Новочеркасск, ул. Просвещения, 132^бСколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Большой бул., 30, стр. 1e-mail: maxshevch@yandex.ru

В докладе рассматривается разработанный коллективом метод синтеза производных гетероциклической системы имидазо[4,5-*b*]пиридиния **1**, имеющих важное прикладное значение в качестве прекурсоров М/ННС комплексов с ценными фотофизическими характеристиками [1,2].

В отличие от известных подходов, основанных на достройке имидазольного цикла к пиридиновому с использованием труднодоступных 2,3-диаминопиридинов в качестве исходных соединений [3], предлагаемый нами альтернативный путь синтеза на основе солей 4-аминоимидазолия **2** [4,5] имеет существенные преимущества. Кроме высоких выходов и лёгкости проведения реакций, данная методология привлекательна тем, что позволяет вводить объёмные ароматические заместители на атомы азота в положениях 1 и 3 имидазольного цикла, а также функциональную гидроксид- (оксо)-группу в положение 7. Реакционная способность последней позволила синтезировать ряд солей имидазо[4,5-*b*]пиридиния с различными заместителями в пиридиновом ядре.

Алкилирование системы **1** в основной среде затрагивает атомы кислорода и углерода, тогда как N-алкилирование не наблюдается. При действии триалкилортоформатов в кислой среде реакция идет с селективным образованием 7-алкоксипроизводных **3**. Обработка **1** POCl₃ приводит к хлорпроизводным **4**, которые далее были исследованы в реакциях нуклеофильного замещения, что позволило синтезировать соли **5,6**. Полученные соли **1-5** были исследованы в качестве пролигандов для получения М/ННС комплексов.



Литература

1. Pinter, P., Soellner, J. and Strassner, T., *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2021**(30), 3104-3107.
2. Yang, X., Zhou, X., Zhang, Y.-X., ..., Chi, Y., *Adv. Sci.*, 2022, **9**(25), 2201150.
3. Pinter, P., Pittkowski, R., Soellner, J., Strassner, T., *Chem. Eur. J.*, 2017, **23**(57), 14173-14176.
4. Шевченко, М., Пасюков, ..., Чернышев, В., *ДРАН-ХНОМ*, 2024, **515**(1), 18-29.
5. Shevchenko, M., Malakhov, A., Chernyshev, V., *Russ. J. Gen. Chem.*, 2024, **94**(12), 3263-3276.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00426).

ОСНОВНО-КАТАЛИЗИРУЕМЫЕ РЕАКЦИИ АРИЛТРИАЗОЛИЛМЕТАНОВ

Шетнев А.А., Котлярова В.Д., Корсаков М.К., Котов А.Д.

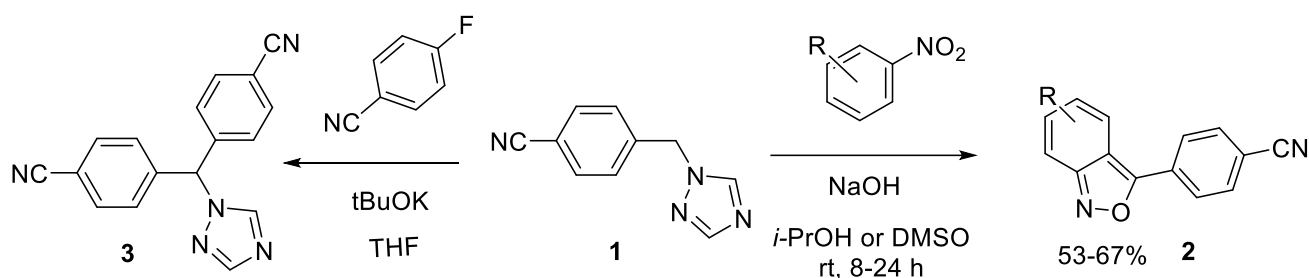
Ярославский государственный педагогический университет им. К.Д. Ушинского,

150000, Ярославль, ул. Республиканская 108

e-mail: a.shetnev@yspu.org

Три и тетразамещенные метаны, содержащие азольные заместители в при sp^3 гидридизованном атоме, являются одной из привилегированных структур в области разработки современных лекарственных средств. Среди них следует отметить эффективные противогрибковые препараты (Флутримазол, Клотрималоз), средства для лечения гормон-зависимых опухолей (Летрозол, Анастрозол, Воразол) препараты для лечения недержания (Дарифенацин) и коммерчески-успешные анальгетики (Дифеноксилат).

Одним из основных путей к синтезу данных, востребованных в медицинской химии, органических структур являются реакции $CN(sp^3)$ -функционализации метиленового мостика бензилазиновых и бензилазольных гетероциклов.



4-((1H-1,2,4-Триазолил)метил)-бензонитрил (**1**) является ключевым полупродуктом в синтезе летрозола (**2**). В настоящей работе представлено использование **1** и его аналогов в качестве нового типа нуклеофильных реагентов, в которых триазольный цикл выступает нуклеофитом. В частности, предложен новый основно-катализируемый способ синтеза 2,1-бензизоксазолов **2** по реакции N-бензилтриазолов с ароматическими нитропроизводными [1]. Данные реагенты оказались эффективной и безопасной заменой бензилцианидам в процессах идущих с отщеплением цианид-ионов и синильной кислоты. При этом новые циано-замещенные производные 2,1-бензизоксазола оказались изоформ-специфическими наномолярными ингибиторами моноаминоксидазы-Б человека, что дает основания для их изучения в качестве лекарственных кандидатов для лечения нейродегенеративных заболеваний.

В докладе будет также обсуждаться реакция димеризации бензилтриазолов с образованием пространственно-нагруженных тетраарилметанов, имеющих потенциал применения в качестве противоопухолевых агентов направленного действия.

Литература

1. Shetnev A., Kotov A., Kunichkina A., Proskurina I., Baykov S., Korsakov M., Petzer A., Petzer, J. P. Monoamine oxidase inhibition properties of 2, 1-benzisoxazole derivatives. *Molecular Diversity*, 2024, **28**(3), 1009-1021.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (грант № 25-23-00728)

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ N-(3,3-ДИ(ГЕТЕРО)АРИЛ)-2-ХЛОРАЦЕТАМИДА – ПЕРСПЕКТИВНЫХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ АГЕНТОВ

**Шибасева К.О.^{а,б}, Волина Н.Е.^в, Смолобочкин А.В.^а, Газизов А.С.^а,
Бурилов А.Р.^а, Пудовик М.А.^а**

^аИнститут органической и физической химии

им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия.

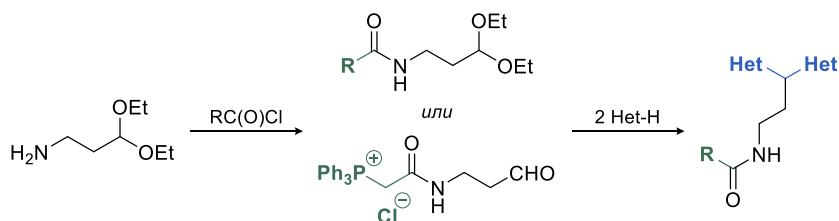
^бКазанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

^вКазанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

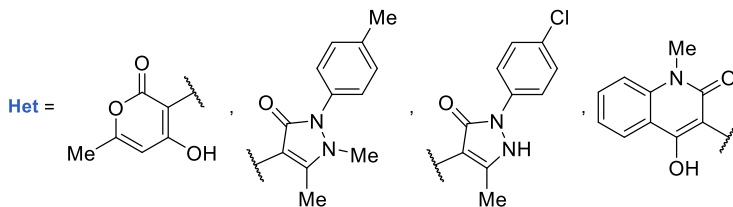
e-mail: shikaol@yandex.ru

В настоящий момент все еще сохраняется острая потребность в синтезе новых противоопухолевых препаратов. Среди таких средств одними из самых перспективных остаются препараты, способные избирательно вызывать гибель опухолевых клеток с минимальным токсическим действием по отношению к здоровым клеткам организма. Создание таких лекарственных средств является важной и актуальной задачей.

В ходе работы был синтезирован ряд гетероциклических соединений на основе N-замещенных 3,3-диэтоксипропан-1-аминов. Была изучена их цитотоксическая активность относительно опухолевых (HuTu 80 и M-HeLa) и здоровых (Chang liver) клеточных линий человека. В качестве препарата сравнения при этом был использован Доксорубин, «золотой стандарт» терапии первой линии в лечении сарком мягких тканей. Примечательно, что синтезированные соединения, в отличие от препарата сравнения, оказались селективными и малотоксичными по отношению к нормальным клеткам.



R = ClCH₂, Me, Ph, Cl₃C, F₃C, (ClCH₂)₃C



РАЗРАБОТКА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ
СИНТЕЗА ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,3-ТРИАЗОЛОВ

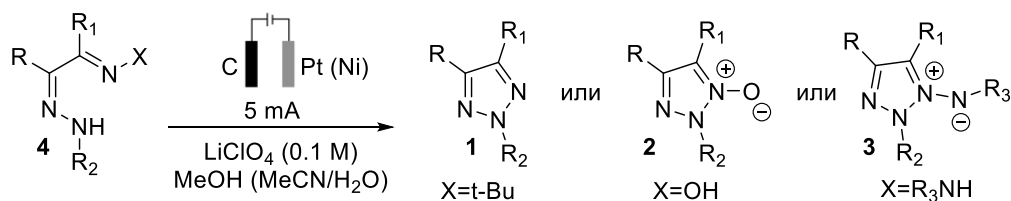
Шуваев А.Д., Ферштат Л.Л.

Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия

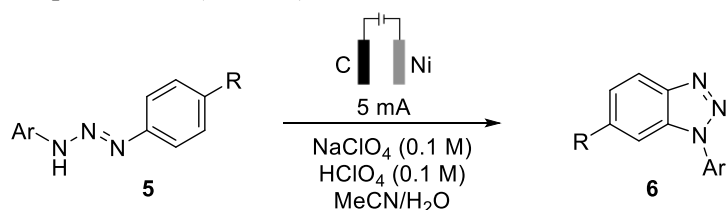
e-mail: aleksandrbrauer17@gmail.com

Производные 1,2,3-триазола (2*H*-1,2,3-триазолы, 1*H*-1,2,3-триазолы, их *N*-оксиды, *N*-имины и полициклические производные) являются важными представителями гетероциклических соединений, обладающих широким спектром применения. Однако конструирование подобных систем осложнено необходимостью использования соединений тяжелых металлов в ходе синтеза, что повышает экологическую нагрузку при производстве, а также требует дополнительной очистки фармакологических субстанций, значительно повышая их стоимость. Создание универсальных электрохимических методов синтеза 1,2,3-триазолов позволит уменьшить экологическую нагрузку при их синтезе, повысит доступность данных соединений для исследователей и расширит библиотеку представителей данного класса соединений.

В ходе исследований были разработаны методы синтеза 2*H*-1,2,3-триазолов **1**, 2*H*-1,2,3-триазол-1-оксидов **2** [1], 2*H*-1,2,3-триазол-1-иминов **3** [2], основанные на электрохимическом окислении α -иминогидразонов **4** (схема 1). Все рассматриваемые реакции были проведены в неразделенной электрохимической ячейке с использованием доступного графитового анода и никелевого или платинового катода. В качестве дополнительного понижения экологической нагрузки были разработаны методы выделения и очистки применяемых в ходе реакции электролитов и растворителей. Также было проведено декаграммовое масштабирование реакции для отдельных соединений.

Схема 1. Общая схема синтеза 2*H*-1,2,3-триазолов 1-3

Для создания бициклических производных 1*H*-1,2,3-триазолов была исследована возможность электрохимического окисления 1,3-диарилтриазенов **5**. В ходе работы была показана возможность образования 1*H*-бензо[*d*][1,2,3]триазолов **6** (схема 2).

Схема 1. Общая схема синтеза 1*H*-бензо[*d*][1,2,3]триазолов 6

Литература

1. K. Y. Titenkova, A. D. Shuvaev, F. E. Teslenko, E. S. Zhilin, L. L. Fershtat *Green Chem.*, 2023, **25**, 6686-6693.
2. A. D. Shuvaev, M. A. Feoktistov, F. E. Teslenko, L. L. Fershtat *Adv. Synth. Catal.*, 2024, **366**, 5050-5060.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 24-73-10151).



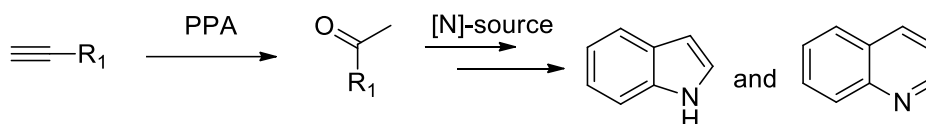
СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К СИНТЕЗУ ПРОИЗВОДНЫХ ИНДОЛОВ И ХИНОЛИНОВ НА ОСНОВЕ АЦЕТИЛЕНОВ

Аксенова И.В., Макиева Д.Ч., Арутюнов Н.А., Аксенов А.В.

*Северо-Кавказский Федеральный Университет,
химический факультет, Ставрополь, Россия.
e-mail: inna-aksenova00@rambler.ru*

Алкины являются универсальными строительными блоками в органическом синтезе и хорошо зарекомендовали себя в сборке широкого спектра карбоциклических и гетероциклических соединений. Этот класс является типичным реагентом в реакциях циклоприсоединения 3+2, например, в циклоприсоединении азид-алкин Хьюсгена, реакциях между азометин-илидами и алкинами и другими диполями. Кроме того, реакция Соногаширы, несомненно, является одной из самых эффективных и широко используемых реакций в органическом синтезе. Кроме того, существует множество различных методов получения важных продуктов с использованием алкинов в качестве исходных материалов. Одним из наиболее важных синтетических применений алкинов является присоединение воды, приводящее к карбонильному соединению. Впервые обнаруженная Кучеровым в 1884 году, гидратация терминальных алкинов по Марковникову является методом получения метилкетонов. Недавние усилия научных групп были направлены на замену высокотоксичных солей ртути более безопасными катализаторами, такими как золото, серебро, медь и другие соли и комплексы. В данной работе представлены новые подходы к сборке индольных и хинолиновых структур, основанных на стратегии гидролиза тройной связи углерод-углерод



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00126).

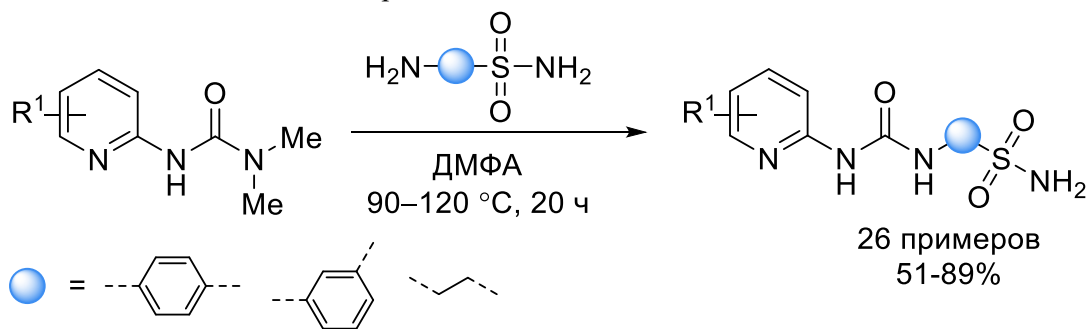
СИНТЕЗ N-ПИРИДИЛМОЧЕВИН ДЛЯ КОМБИНИРОВАННОЙ ТЕРАПИИ ОНКОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

Байкова С.О.^а, Солодянкина О.В.^а, Шаройко В.В.^б, Байков С.В.^а, Боярский В.П.^а

^аСанкт-Петербургский государственный университет,
Институт химии, Санкт-Петербург, Россия.

^бПервый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет имени академика И.П. Павлова,
Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: s.baykova@spbu.ru

Ранее нами был разработан метод получения N-(арил)- или N-(алкил)-N'-(пиридин-2-ил)мочевин реакцией N,N-диалкил-N'-(пиридин-2-ил)мочевин с первичными и вторичными ароматическими и алифатическими аминами [1]. При использовании данного подхода нам удалось получить ряд пиридин-2-илмочевин, содержащих сульфонамидный фрагмент и обладающих высоким разнообразием заместителей в пиридиновом кольце. Данные соединения являются аналогами высокоселективного ингибитора IX изоформы карбоангидразы человека (КАЧ IX) SLC-0111, дошедшего до стадии клинических испытаний [2]. В рамках данной работы выполнено исследование ингибиторной активности ряда синтезированных уреидобензолсульфонамидов, причем четыре соединения проявили более высокую способность к ингибированию КАЧ, чем SLC-0111. Для наиболее активных соединений было проведено исследование антипролиферативного действия в комбинации с рядом коммерческих противоопухолевых препаратов с использованием панели клеточных линий рака легкого.



Литература

1. S.O. Kasatkina, K.K. Geyl, S.V. Baykov, M.S. Novikov, V.P. Boyarskiy. *Adv. Synth. Catal.*, 2022, **364**, 1295.
2. P.C. McDonald, S. Chia, P.L. Bedard, Q. Chu, M. Lyle, L. Tang, M. Singh, Z. Zhang, C.T. Supuran, D.J. Renouf, S. Dedhar. *Am. J. Clin. Oncol.* 2020, **43**, 484.

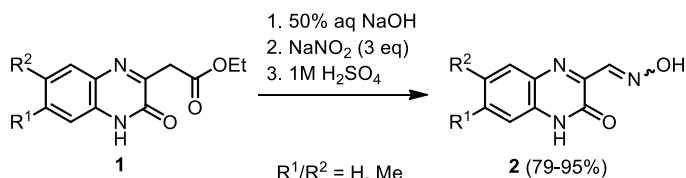
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-73-00066). Все физико-химические измерения проводились в Научном парке Санкт-Петербургского государственного университета (РЦ «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества»).

НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА ХИНОКСАЛИН-2(1H)-ОН-3-КАРБАЛЬДОКСИМОВ

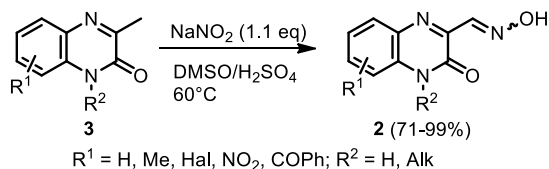
Жукова Н.А., Перевалова Д.С., Бесчастнова Т.Н., Сякаев В.В., Мамедов В.А.Институт органической и физической химии имени А. Е. Арбузова
ФИЦ Казанский научный центр РАН, Москва, Россия.e-mail: zhukova@iopc.ru

Оксимы и их производные находят широкое применение в медицинской и промышленной химии [1,2], сельском хозяйстве [3], а также органическом синтезе [4]. Классический подход к синтезу альдоксимов основан на конденсации альдегидов с гидроксиламином [2]. Применение данного подхода к синтезу гетарилкарбальдоксимов существенно ограничивают узкий круг и высокая стоимость коммерчески доступных гетарилкарбальдегидов, а также трудности, связанные с функционализацией целевых продуктов. В связи с этим поиск новых и усовершенствование известных методов синтеза гетарилкарбальдоксимов является актуальной задачей.

Целью нашей работы стал поиск нового способа получения хиноксалин-2(1H)-он-3-карбальдоксимов. Известный метод синтеза этих соединений базируется на производных 3-этоксикарбонилметилхиноксалин-2(1H)-она и включает в себя следующие стадии: гидролиз и нитрозирование с последующим декарбоксилированием [5]. Было показано, что этот метод хорошо работает только в случае незамещенного хиноксалин-2(1H)-она и его моно- и диметилзамещенных производных.



Нами предложен новый простой в исполнении и эффективный метод синтеза хиноксалин-2(1H)-он-3-карбальдоксимов нитрозированием легко доступных 3-метилхиноксалин-2(1H)-онов при нагревании в ДМСО в присутствии серной кислоты. Данный метод позволяет получать производные хиноксалин-2(1H)-он-3-карбальдоксима как с электронодонорными, так и электроноакцепторными заместителями.



Полученные хиноксалин-2(1H)-он-3-карбальдоксими представляют интерес в качестве универсальных строительных блоков для органического синтеза.

Литература

1. N. Chandran, K. Bose, A. C. Thekkantavida, R. R. Thomas, K. Anirudhan, S. Bindra, S. Sura, H. Ammar Hasan, S. Kumar, T. M. Rangarajan, A. G. Al-Sehemi, P. Gahtori, H. Kim, B. Mathew *ChemistrySelect*, 2024, **9**, e202401726.
2. K. A. Rykaczewski, E. R. Wearing, D. E. Blackmun, C. S. Schindler *Nat. Synth.*, 2022, **1**, 24.
3. Y. Wang, C. Wang, Q. Tian, Y. Li *J. Agric. Food Chem.*, 2024, **72**, 15077.
4. H.-M. Jiang, Y.-L. Zhao, Q. Sun, X.-H. Ouyang, J.-H. Li *Molecules*, 2023, **28**, 1775.
5. J. Klicnar, M. Hajek, I. Dobas *Coll. Czech. Chem. Commun.*, 1965, **30**, 3092.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РНФ (грант 24-13-00098).

СИНТЕЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТИ 5,7-ЗАМЕЩЕННЫХ 6-ЦИАНОАЗОЛО[1,5-*a*]ПИРИМИДИНОВ

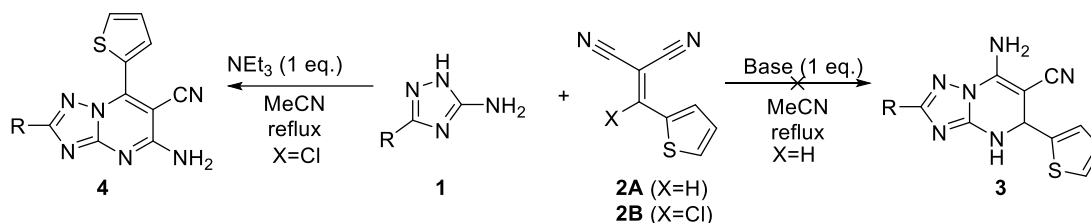
Буторин И.И., Фесенко Е.А., Русинов В.Л.

Уральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19
e-mail: iibutorin@urfu.ru

Азоло[1,5-*a*]пиримидины являются одним из привилегированных классов гетероциклических соединений с широким спектром полезной биологической активности [1].

В рамках представленной работы исследованы синтетические границы реакции Михаэля между производными 2-циано-3-(тиен-2-ил)-акрилонитрилами и аминазолами, дальнейшая циклизация которых приводит к образованию соответствующих 5,7-замещенных азоло[1,5-*a*]пиримидинов. Данный подход является дальнейшим развитием ранее опубликованного метода синтеза 5-арилзамещенных 7-амино-6-цианоазоло[1,5-*a*]пиримидинов [2].

Установлено, что в исследуемом ряду аминазолов реакции с акрилонитрилом **2A** не приводят к образованию целевых 7-аминоазоло[1,5-*a*]пиримидинов **3**, что связано, по-видимому, низкой стабильностью акрилонитрилов в основной среде. Варьирование оснований также не позволило преодолеть возникшее ограничение. С другой стороны, использование хлорзамещенного акрилонитрила **2B**, генерируемого *in situ*, позволило получить ряд 5-амино-7-(тиен-2-ил)-6-цианоазоло[1,5-*a*]пиримидинов **4** с умеренными выходами.



R: SMe, SEt, SPr, SBn, furan-2-yl, thien-2-yl, prop-2-yn-1-ylthio

Base: NEt₃, Piperidine, DIPEA, DBU; K₂CO₃ (with DMF as solvent)

Для производных представленного ряда также установлено высокое фармакофорное подобие к некоторым эффекторам молекулярных мишеней опухолевых патологий (CK2, CDK2) и цитотоксическим агентам клеточных линий рака в целом [3].

Литература

- Oukoloff K., Lucero B., Francisco K.R., Brunden K.R., Ballatore C., *Eur. J. Med. Chem.*, **2019**, 165, pp. 332–346.
- Butorin, I. I.; Melekhin, V. V.; Chirkov, D. D.; Tokhtueva, M. D.; Zonov, A. A.; Konovalova, O. A.; Fesenko, E. A.; Chernysheva, A. E.; Slepukhin, P. A.; Kotovskaya, S. K.; Rusinov, V. L. *Chimica Techno Acta* **2025**, 12 (2).
- Dowling, J.E.; Chuaqui, C.; Pontz, T.W.; Lyne, P.D.; Larsen, N.A.; Block, M.H.; Chen, H.; Su, N.; Wu, A.; Russell, D.; et al. *ACS Med. Chem. Lett.* **2012**, 3, pp. 278–283.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-13-20011).

ПОЛУЧЕНИЕ «PUSH-PULL» СИСТЕМ НА ОСНОВЕ 2*H*-ИМИДАЗОЛИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1-МЕРКАПТО-О*РТО*-КАРБОРАНОВ

Васькина Н.Ф.,^а Никифоров Е.А.,^а Мосеев Т.Д.,^а
Вараксин М.В.,^{а,б} Чарушин В.Н.,^{а,б} Чупахин О.Н.^{а,б}

^аУральский федеральный университет, ул. Мира, 19, 620062 Екатеринбург, Россия

^бИнститут органического синтеза им. Постовского УрО РАН,

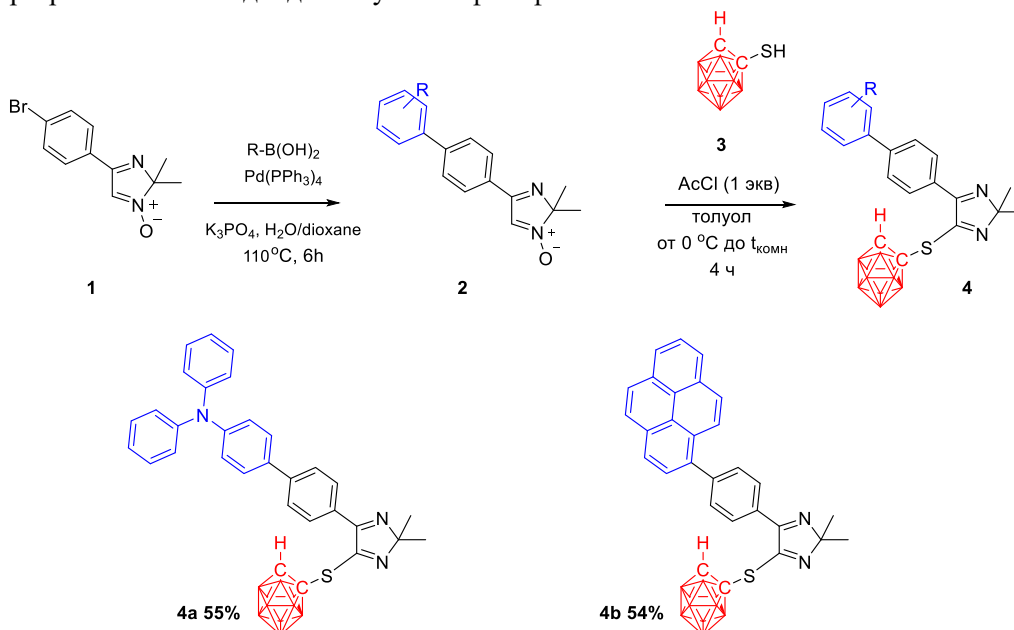
ул. С. Ковалевской, 22, 620066 Екатеринбург, Россия

e-mail: timofey.moseev@urfu.ru

В настоящее время развитие новых функциональных материалов затрагивает поиск новых структур с уникальными физико-химическими свойствами. В контексте данной области исследования, карборановый кластер представляет особый интерес, сочетая в себе высокую химическую стабильность, трехмерную ароматичность и возможность структурной модификации.

За счет делокализованной электронной плотности, карборановый фрагмент устойчив к температурным, окислительным и радиационным воздействиям, что делает их перспективными блоками для создания стойких полимерных структур. Помимо этого, введение карборанового кластера в π -сопряженные молекулы позволяет избежать π - π стэкинга и связанного с ним эффекта тушения флуорисценции, а также способствует облегчению явления АИЕ, тем самым делая его эффективным фрагментом для создания, в том числе, твердотельных люминесцентных материалов.

Настоящая работа посвящена разработке новой синтетической технологии получения разветвленных push-pull систем на основе 2*H*-имидазолильных производных 1-меркапто-о*рто*-карборана. Этот метод включает проведение реакции кросс-сочетания для получения молекулы имидазола **1** с электродонорным фрагментом и/или расширенной системой π -сопряжения, с последующим проведением С-Н/С-Н сочетания полученной структуры **2** с меркапто-о-карбораном **3** по механизму S_N^H (АЕ). В результате было синтезировано два новых соединения с выходами 54 и 55%, дальнейшее исследование будет направлено на расширение границ применимости разработанного подхода и изучения фотофизических свойств.

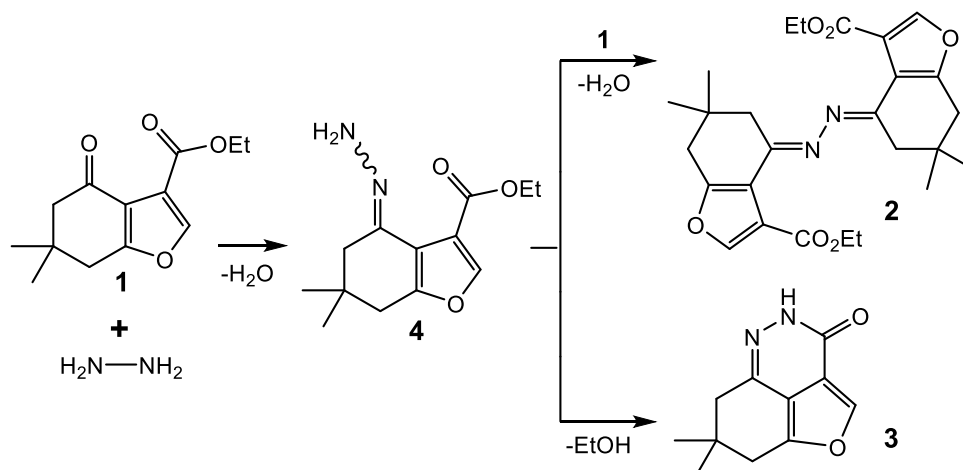


ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭТИЛ 6,6-ДИМЕТИЛ-4-ОКСО-4,5,6,7-ТЕТРАГИДРОБЕНЗО-ФУРАН-3-КАРБОКСИЛАТА С ГИДРАЗИНОМ: DFT ИССЛЕДОВАНИЕ

Верещагина Я.А.^а, Кузнецова А.А.^а, Гомонов К.А.^б, Пелипко В.В.^б, Макаренко С.В.^б^аКазанский федеральный университет,
Химический институт имени А.М. Бутлерова, Казань, Россия
e-mail: yavereshchagina@gmail.com^бРоссийский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена,
Санкт-Петербург, Россия

Гидразоны замещенных фуранов обладают потенциальной биологической активностью [1]. Недавно предложен метод синтеза гидразонов алкил 4-оксо-4,5,6,7-тетрагидробензофуран-3-карбоксилатов в *E*-конфигурации [2]. Взаимодействие этил 6,6-диметил-4-оксо-4,5,6,7-тетрагидробензофуран-3-карбоксилата **1** с гидразином может приводить к двум типам продуктов: в мягких условиях образуется *бис*-гидразон **2**, а ужесточение условий приводит к образованию фуроциннолин-3-она **3** [2].

Для выявления особенностей протекания этих взаимодействий мы изучили механизм реакций с помощью метода квантовой химии DFT B3PW91/6-311++G(df,p) с включением молекул растворителя. Согласно теоретическим расчётам, реакция **1** с гидразином с последующим отщеплением молекулы воды приводит к промежуточному гидразону **4** в *E*- или *Z*-конфигурации. Диэтил 4,4'-(гидразин-1,2-диилиден)(4*E*,4'*E*)-бис(6,6-диметил-4,5,6,7-тетрагидробензофуран-3-карбоксилат – *бис*-гидразон **2** – предпочтительно образуется из *E*-формы **4** и дополнительной молекулы **1**, тогда как для формирования 7,7-диметил-2,6,7,8-тетрагидро-3Н-фуро[4,3,2-де]циннолин-3-она **3** благоприятна *Z*-конфигурация **4**, геометрия которой приближена к структуре продукта.



Будут обсуждены структурные и энергетические характеристики всех участников процесса и переходные состояния всех стадий реакций.

Литература

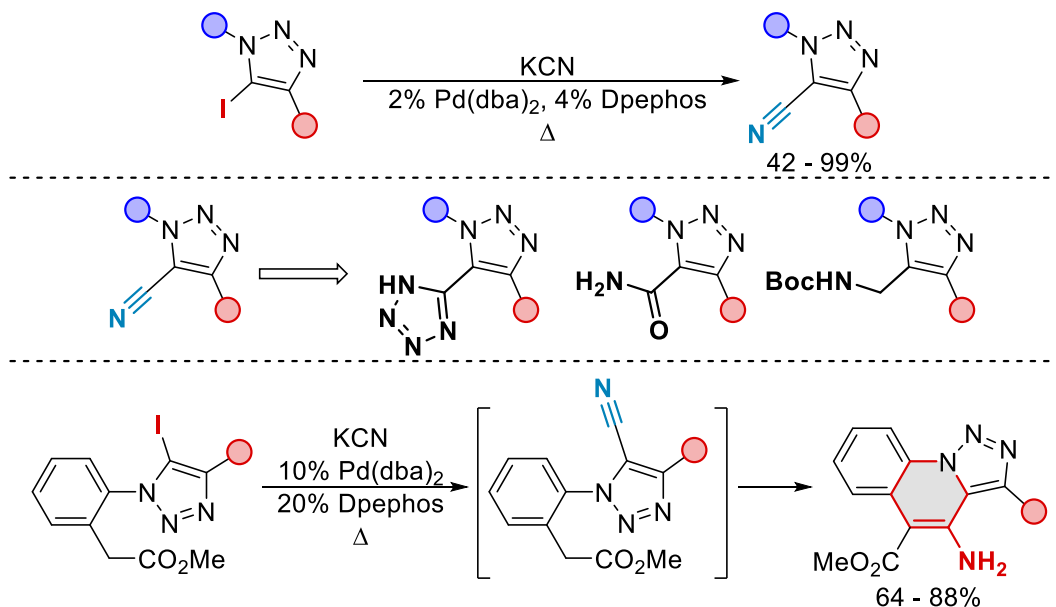
1. S.S. Chourasiya, D. Kathuria, A.A. Wani, P.V. Bharatam *Org. Biomol. Chem.*, 2019, **17**, 8486.
2. K.A. Gomonov, V.V. Pelipko, I.A. Litvinov et al. *Monatsh Chem.*, 2025, **156**, 287.

РЕАКЦИЯ Pd-КАТАЛИЗИРУЕМОГО ЦИАНИРОВАНИЯ В СИНТЕЗЕ 5-ЦИАНО-1,2,3-ТРИАЗОЛОВ И ТРИАЗОЛО[1,5-*a*]ХИНОЛИНОВГалашев Р.Н.^а, Латышев Г.В.^а, Котовщikov Ю.Н.^а, Лукашев Н.В.^а, Белецкая И.П.^а

^аМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.
e-mail: rostislav.galashev@chemistry.msu.ru

1,2,3-Триазолы нашли широкое применение в различных областях, таких как координационная химия, катализ, материаловедение, агрохимия и медицинская химия. Однако наиболее распространённый и простой метод создания триазольного кольца, реакция Cu-катализируемого (3+2)-циклоприсоединения азидов к терминальным ацетиленам, ограничен получением 1,4-дизамещённых триазолов. При этом столь же универсального подхода к 1,4,5-тризамещённым триазолам не существует. Возможными методами синтеза подобных соединений являются реакции нуклеофильного замещения и катализируемого соединениями переходных металлов кросс-сочетания в 5-иод-1,2,3-триазах. Эти реакции позволяют получать широкий набор труднодоступных тризамещённых 1,2,3-триазолов, исходя из легко синтезируемых с использованием медного катализа 5-иодтриазолов.

Нами разработан подход к 5-циано-1,2,3-триазам, основанный на реакции Pd-катализируемого цианирования 5-иодтриазолов [1]. Этот метод эффективен для получения различных 5-цианотриазолов, содержащих ароматические, алифатические и гетероциклические заместители, однако лишь ограниченно применим для соединений, в структуре которых содержатся даже малые стерические препятствия. Проведена последующая модификация нитрильной группы для получения ряда азатетрациклов, а также производных аминов и карбоновых кислот. Цианирование производных фенилуксусных кислот позволяет получить триазоло[1,5-*a*]хинолины в ходе каскада реакций цианирования и внутримолекулярной циклизации.

**Литература**

- Galashev, R.N., Latyshev, G.V., Kotovshchikov, Y.N., Lukashev, N.V., Beletskaya, I.P., *Org. Biomol. Chem.*, 2025, **23**, 4725–4729.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-73-10043).

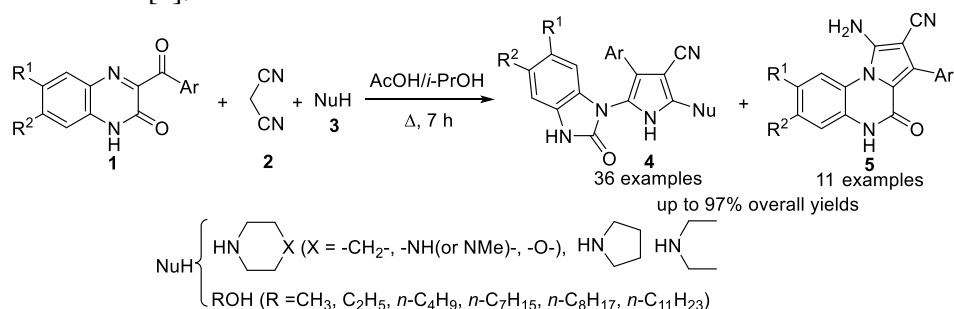
ПЕРЕГРУППИРОВКИ МАМЕДОВА И ДИМРОТА В СИНТЕЗЕ БИ- И ТРИ “ЛИНЕЙНЫХ” И КОНДЕНСИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Галимуллина В.Р., Хафизова Е.А., Латыпов Ш.К., Синяшин О.Г., Мамедов В.А.

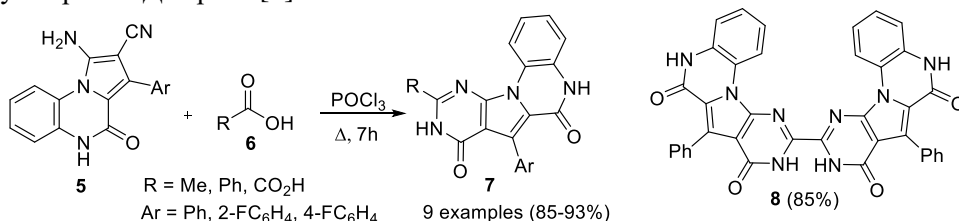
Институт органической и физической химии имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, лаборатория химии гетероциклических соединений, Казань, Россия.

e-mail: ven_gal@mail.ru

Разработан новый эффективный метод синтеза различно замещённых полифункционализированных пирролов. Метод базируется на перегруппировке Мамедова [1] хиноксалинонов с участием *in situ* генерируемого 2-ен-1-иминного заместителя при С-3, который позволяет в *one-pot* процессе сконструировать одновременно две новые гетероциклические системы, 1-(пиррол-2(3)-ил)-бензимидазол-2-оновую и 1-имино-2-циано-3-арилпирроло[1,2-*a*]хиноксалин-4(5*H*)-оновую. Реакция легко реализуется смешиванием трёх реагентов (хиноксалин-3(4*H*)-онов **1**, малонитрила **2** и вторичных аминов или первичных спиртов **3**) в спиртовом растворе в присутствии уксусной кислоты при нагревании в течение 7 часов. Вторичные амины или первичные спирты в качестве третьего компонента реакции не только инициируют перегруппировку, но и отвечают за природу заместителей в положении 5 пиррольного кольца в сконструированной новой бигетероциклической системе [2].



Кипячение пирроло[1,2-*a*]хиноксалин-4(5*H*)-онов **5** в растворе POCl_3 в присутствии соответствующих карбоновых кислот **6** благодаря amino- и циано- группе в положениях 1 и 2 соединений **5** обеспечивает образование 10-*R*-7-арилпиримидо[5',4':4,5]пирроло[1,2-*a*]хиноксалин-6,8(5*H*,9*H*)-дионов **7** и **8** в результате протекания перегруппировки Димрота [3].



Литература

1. A. Hassner, I. Namboothiri, *Organic Syntheses Based on Name Reactions*, 3th ed.; Elsevier: Amsterdam, 2012; p 299.
2. V. A. Mamedov, E. A. Khafizova, N. E. Algaeva, S. K. Latypov, O. G. Sinyashin *J. Org. Chem.*, 2020, **85**, 9887.
3. V. A. Mamedov, N. A. Zhukova, M. S. Kadyrova *Chem. Heterocycl. Compd.*, 2021, **57**, 342.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФ (грант 24-13-00098).
Физико-химические исследования проведены в ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН.

СТРОЕНИЕ КАРБОЦИКЛИЧЕСКИХ ГИДРАЗОНОВ ОКСАЗОЛ-5-(4*H*)-ОНАГринёв В.С.^а, Складар А.Е.^а, Демешко И.А.^а

^аФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского», Саратов, Россия
e-mail: grinevvs@squ.ru

Химия гидразонов оксазол-5(4*H*)-она вызывает особый интерес благодаря широким возможностям для модификации данных структур, а также проявляемыми ими оптическими свойствами. Карбоциклические гидразоны оксазол-5(4*H*)-она получены нами по реакции азосочетания с оксазолона *in situ* с замещёнными анилинами (рис. 1).

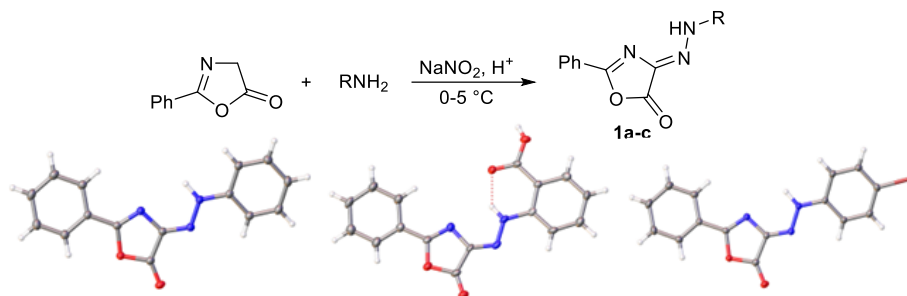


Рис. 2 Синтез и строение в кристалле представителей гидразонов оксазол-5(4*H*)-она 1a-c

Продукт, очевидно, представляет собой смесь *Z*- и *E*- изомеров, однако по данным ЯМР ¹H спектроскопии и ВЭЖХ один из изомеров значительно превалирует (рис. 2). В кристаллическом виде для ряда гидразонов (1a-c) были получены монокристаллы и выполнен РСА, который показал, что в твёрдом виде исследованные гидразоны существуют исключительно в *Z*-форме (рис. 1).

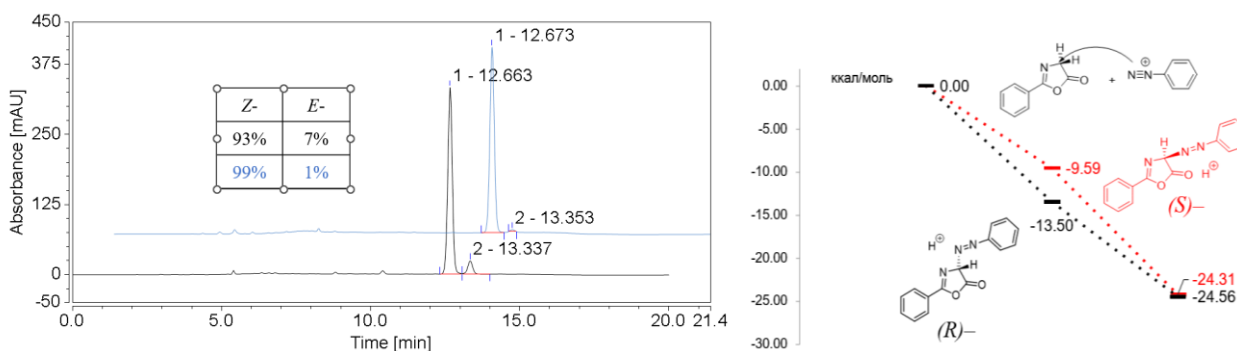


Рис. 2 Хроматограммы до и после перекристаллизации представителя гидразонов оксазол-5(4*H*)-она, а также относительные энергии энантиомерных интермедиатов, образующихся в ходе реакции

В зависимости от направления атаки катиона возможно образование двух энантиомерных интермедиатов: *R*- или *S*-2-фенил-4-(фенилдиазенил)оксазол-5(4*H*)-она. Интермедиат с абсолютной конфигурацией *R* оказывается в вакууме на 3,91 ккал/моль более выгодным энергетически. Расчёты показали, что независимо от расположения и природы заместителя в арилгидразонном фрагменте образование обоих изомеров приблизительно одинаково выгодно термодинамически. Однако наличие разных заместителей может существенно влиять на термодинамическую стабильность энантиомерных интермедиатов. В то же время, *S*-интермедиат во всех изученных гидразонах существенно термодинамически менее выгоден, что и обуславливает стереоселективное течение реакции и преимущественное образование *Z*-изомеров для всех замещённых карбоциклических арилгидразонов 1, не исключая образование минорного *E*-изомера.

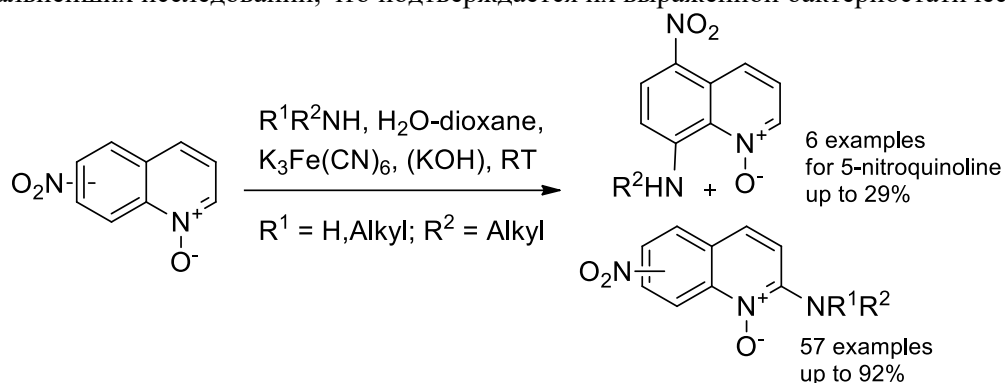
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00482).

OSNH АЛКИЛАМИНИРОВАНИЕ N-ОКСИДОВ НИТРОХИНОЛИНОВ В ВОДНОЙ СРЕДЕ

**Демидов О.П., Ларин А.Н., Авакян Е.К., Побединская Д.Ю., Боровлева А.А.,
Ермоленко А.П., Боровлев И.В.**

Северо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина, 1а, Ставрополь, 355009, Россия
e-mail: odemidov@ncfu.ru

Разработаны методы прямого окислительного замещения водорода на алкиламиногруппы в молекулах N-оксидов 5(6,7,8)-нитрохинолина в водно-диоксановой среде, что необычно для реакции Чичибабина [1]. Данный подход отличается простотой выполнения, применением доступных и безопасных реагентов, а также легкостью масштабирования. Процесс протекает с сохранением N-оксидной группы, которая играет ключевую роль в определении региоселективности этих реакций с участием молекул первичных и вторичных алифатических аминов как нейтральных N-нуклеофилов. Предложенный синтетический подход является ценным инструментом для получения новых производных хинолина с потенциально полезными свойствами. Синтезирована обширная библиотека вторичных и третичных аминов на основе N-оксидов 5(6,7,8)-нитрохинолина. Результаты исследования биологической активности случайной выборки полученных продуктов демонстрируют значительные перспективы новых производных хинолина в качестве кандидатов для дальнейших исследований, что подтверждается их выраженной бактериостатической активностью.

**Литература**

1. A.N. Larin, E.K. Avakyan, O.P. Demidov, A.A. Boroyleva, A.A. Zubenko, D.Y. Pobedinskaya, A.P. Ermolenko, S.E. Kolosov, I.V. Borovlev Eur. J. Org. Chem. – 2024. – V. 28. – № 3. – Reg. 202401060.

Исследование финансировалось за счет гранта Российского научного фонда 24-23-00300, <https://rscf.ru/project/24-23-00300/>.

ЦИКЛИЗАЦИИ 5-ЭТИНИЛПИРИМИДИНОВ ДЛЯ СИНТЕЗА ЕНДИИНОВЫХ АНТИБИОТИКОВ НА ОСНОВЕ ТИЕНО[2,3-*d*]ПИРИМИДИНОВЫХ, ФУРО[2,3-*d*]ПИРИМИДИНОВЫХ И 7-ДЕАЗАПУРИНОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

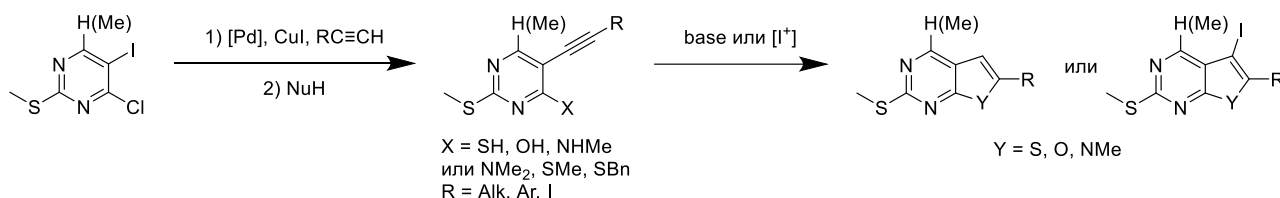
Диденко Е.А., Парфенюк А.Д., Балова И.А., Говди А.И.

Санкт-Петербургский государственный университет,
институт химии, Санкт-Петербург, Россия.e-mail: didenkoegor58@mail.ru

Гетероциклические соединения находят широкое применение в медицинской химии и фармацевтической промышленности. На данный момент больше половины всех лекарственных препаратов содержат в своей структуре гетероциклический фрагмент. Электрофильные и нуклеофильные циклизации ацетиленов являются мощным инструментом синтеза самых разнообразных гетероциклов. Внедрение атома иода в формирующийся цикл является важной задачей, так как это открывает возможности для его дальнейшей функционализации с помощью многочисленных реакций Pd-катализируемого кросс-сочетания и делает синтетическую схему перспективной с точки зрения комбинаторной химии. Иод-промотируемые циклизации и иодирование – два возможных подхода, позволяющих решить данную задачу. Важно отметить, что циклизации иодацетиленов и диацетиленов в сочетании с этими подходами открывают путь к получению синтетических эндиinov – аналогов природного класса соединений с противоопухолевыми свойствами.

На данный момент в литературе отсутствуют примеры получения иодзамещенных тиено[2,3-*d*]пиримидинов, фуоро[2,3-*d*]пиримидинов и 7-деазапуринов с помощью иод-промотируемой циклизации ацетиленов и эндиinov на их основе. Данная работа продолжает исследования нашей научной группы в области гетероциклических аналогов эндиinovых антибиотиков [1,2] и ставит своей целью введение гетероциклического фрагмента, схожего с азотистыми основаниями ДНК, в структуру эндиinov.

Исходный замещенный 5-иод-6-хлорпиримидин был синтезирован и функционализирован с помощью реакций Соногашеры и нуклеофильного замещения при sp^2 -атоме углерода. Результаты изучения нуклеофильных и иод-промотируемых циклизаций полученных 5-этинилпиримидинов и возможности синтеза целевых эндиinovых антибиотиков из них будут обсуждаться в докладе.

**Литература**

1. Ponomarev A. V. et al. Facile synthesis of diiodoheteroindenes and understanding their Sonogashira cross-coupling selectivity for the construction of unsymmetrical enediynes //Organic & Biomolecular Chemistry. – 2024. – Т. 22. – №. 20. – С. 4096-4107.
2. Danilkina N. A. et al. Filling the Gap within 10-Membered Heteroenediynes: Thiaenediynes—An Experimental and Theoretical Study //European Journal of Organic Chemistry. – 2024. – Т. 27. – №. 47. – С. e202401127.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-73-20075).

ПРОИЗВОДНЫЕ α -РОДАНОКАРБОНИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В СИНТЕЗЕ НОВЫХ S,N-ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

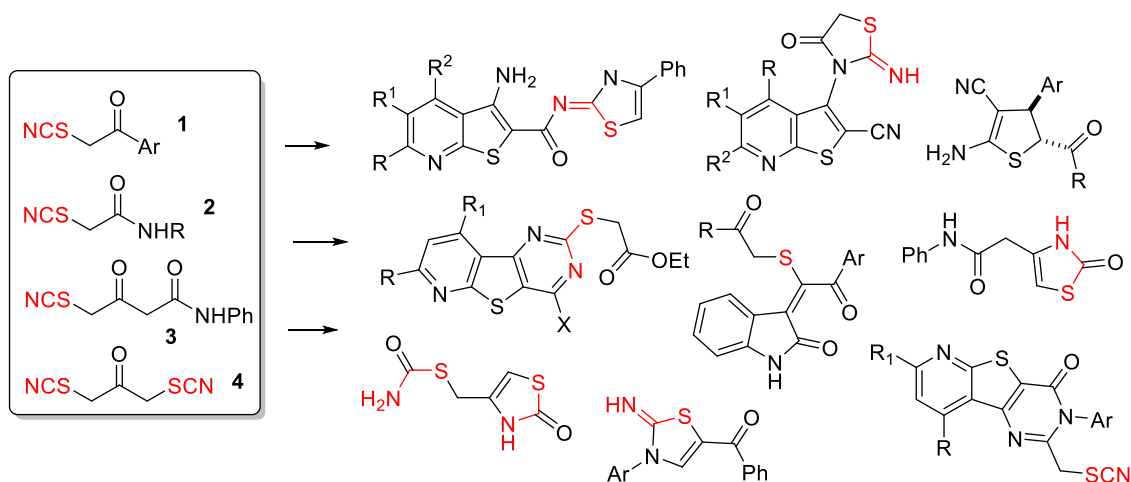
Беспалов А.В.^а, Киндоп В.К.^а, Киндоп Вл.К.^а, Долганов А.А.^а, Руденко С.В.^а, Амирханян А.А.^а,
Шраменко В.В.^а, Вакуленко В.Е.^а, Дисюк В.А.^а, Яценко Р.В.^а, Доценко В.В.^{а,б}

^аКубанский государственный университет,
350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Россия.

e-mail: victor.dotsenko@mail.ru

^бСеверо-Кавказский федеральный университет,
355017, Ставрополь, ул. Пушкина 1, Россия.

Химия органических тиоцианатов (роданидов) является активно развивающейся областью органической химии, что обусловлено синтетическим потенциалом этих соединений и спектром практически полезных свойств продуктов [1-8]. Легко доступные α -роданокарбонильные соединения обладают несколькими активными реакционными центрами, что делает эти соединения привлекательными реагентами для тонкого органического синтеза [1, 5-7]. Нами на основе α -тиоцианатоацетофенонов **1**, α -тиоцианатоацетамидов **2**, γ -тиоцианатоацетоацетанилида **3** и 1,3-дироданоацетона **4** получен ряд новых гетероциклических продуктов, представленных на схеме ниже. Ряд соединений обладает выраженным агрохимическим потенциалом и может быть использован в качестве стимуляторов роста сельскохозяйственных культур и антидотов гербицидов.



Литература

1. В. К. Киндоп, А. В. Беспалов, В. В. Доценко *Химия гетероцикл. соед.*, 2024, **60**, 345.
2. P. G. Karmaker, X. Yang *Chem. Rec.* 2024, **24**, e202300312.
3. H. Chen, X. Shi, X. Liu, L. Zhao *Org. Biomol. Chem.* 2022, **20**, 6508.
4. T. Castanheiro, J. Suffert, M. Donnard, M. Gulea *Chem. Soc. Rev.* 2015, **45**, 494.
5. M. A. Gouda *Synth. Commun.* 2013, **43**, 2547.
6. R. H. Vekariya, H. D. Patel *Synth. Commun.* 2017, **47**, 87.
7. B. Schulze, M. Mühlstädt, I. Schubert *Z. Chem.* 1979, **19**, 41.
8. O. M. Mulina, O. V. Bityukov, V. A. Vil', A. O. Terent'ev *Russ. J. Org. Chem.* 2022, **58**, 1712.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Кубанского научного фонда в рамках научного проекта МПИ-24.1/12.

АТОМ-ЭКОНОМНЫЕ ПОДХОДЫ К НОВЫМ ПИРАЗОЛО[1,5-*a*]ПИРИМИДИНИЛФОСФОНАТАМ

Ефремов А.Н., Девнозашвили Д.Н., Митрофанов А.Ю., Белецкая И.П.

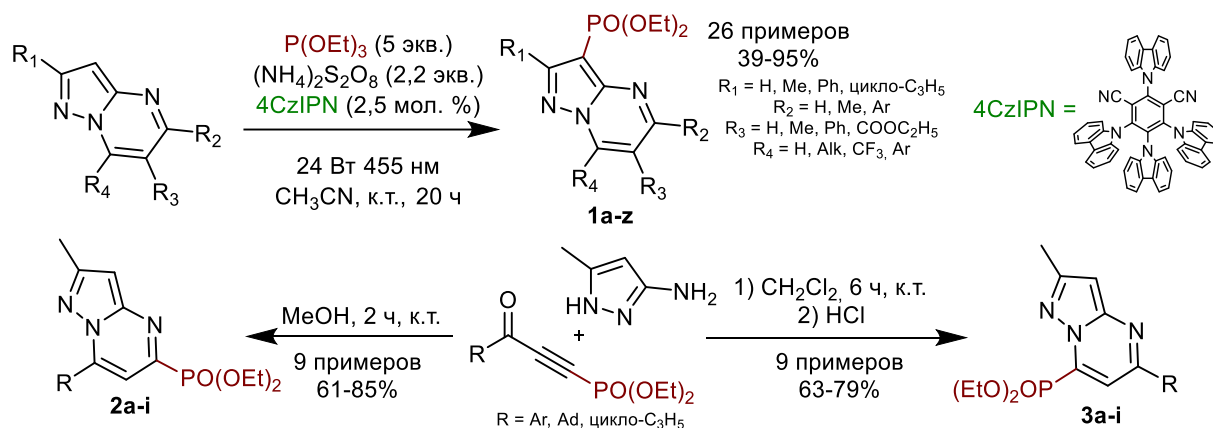
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.
e-mail: andrei.efremov@chemistry.msu.ru

Производные пирозоло[1,5-*a*]пиримидина проявляют биологическую активность и некоторые из них являются коммерчески доступными лекарственными препаратами [1,2]. В то же время применение как в медицине, так и в других областях, находят органические фосфонаты [3,4,5]. В связи с этим, поиск методов синтеза соединений, сочетающих в себе фрагмент пирозоло[1,5-*a*]пиримидина и фосфонатную группу, является актуальной задачей.

В данной работе нами предложены новый фотокаталитический метод С-Н-функционализации пирозоло[1,5-*a*]пиримидинов с образованием соединений с фосфонатной группой в положении 3, а также разработан региодивергентный подход к синтезу (пирозоло[1,5-*a*]пиримидин-5-ил)- и (пирозоло[1,5-*a*]пиримидин-7-ил)фосфонатов.

Для реакции получения (пирозоло[1,5-*a*]пиримидин-3-ил)фосфонатов была проведена оптимизация условий и в найденных условиях при использовании органического фотокатализатора был синтезирован ряд соединений **1a-z** с различными заместителями, при этом более высоких выходов удалось достичь в случае использования исходных соединений с донорными заместителями.

Присоединение аминопирозолов к фосфорилзамещенным инонам, которые ранее использовались как прекурсоры для региодивергентного синтеза пирозолилфосфонатов [6], привело к преимущественному образованию пирозолопиримидин-5-ил- или 7-илфосфонатов в зависимости от природы растворителя. Выяснилось, что изомеры **2a-i** образуются с наибольшим выходом в метаноле, а **3a-i** – в дихлорметане. Получены серии соединений с высокими выходами.



Литература

1. T. H. Iorkula et al. *RSC Adv.*, 2025, **15**, 3756–3828.
2. P. Pattanayak et al. *Chem. Asian J.*, 2025, **20**, e202401610.
3. K. D. Demadis, S. K. Adla, J. Timonen, P. A. Turhanen *Green Chem.*, 2025, **27**, 863-914.
4. C. Queffelec, M. Petit, P. Janvier, D. A. Knight, B. Bujoli *Chem. Rev.*, 2012, **112**, 3777–3807.
5. K. Owsianik, A. Romaniuk, M. Turek, P. Bałczewski *Molecules* 2024, **29**(15), 3691.
6. A. Yu. Mitrofanov, D. N. Devnozashvili, I. P. Beletskaya *Russ. J. Org. Chem.* 2024, **60**, 1149–1156.

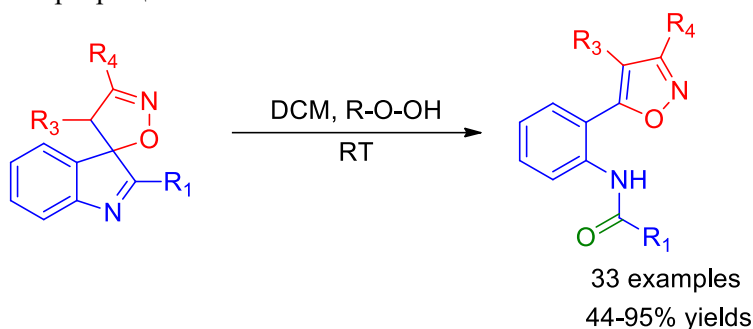
Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение № 075-15-2024-547 от 24.04.2024).

ОКИСЛИТЕЛЬНОЕ РАСКРЫТИЕ СПИРО[ИНДОЛО-3,5'-ИЗОКСАЗОЛОВ] КАК НОВЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ ИЗОКСАЗОЛОВ

Зацепилина А.М., Арутюнов Н.А., Толстов К.В., Шталь Д.А., Аксенов А.В.

Северо-Кавказский Федеральный Университет,
химический факультет, Ставрополь, Россия.
e-mail: ann.zazaza.2002@gmail.com

Несколькими годами ранее, нашей научной группой был разработан синтез спиро[индоло-3,5'-изоксазолов] реакцией индолов с нитроалкенами в кислой среде [1]. В данной работе мы бы хотели представить новое применение данных спироциклических каркасов, открывающее доступ к высокофункционализированным производным изоксазолов. Необычное окислительное раскрытие индольного цикла приводит к ароматизации изоксазольного фрагмента, образуя при этом бензамидную функцию, доступную для дальнейших превращений

**Литература**

1. Aksenov, A. V., Aksenov, D. A., Arutiunov, N. A., Aksenov, N. A., Aleksandrova, E. V., Zhao, Z., Liqin Du, Kornienko A., Rubin, M. *J. Org. Chem*, 2019, **84** (11), 7123-7137.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-73-20003).

1H-ПИРАЗОЛ-4-КАРБАЛЬДЕГИДЫ С ФРАГМЕНТОМ ЭКРАНИРОВАННОГО ФЕНОЛА: СРАВНЕНИЕ АНТИОКИСЛИТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ

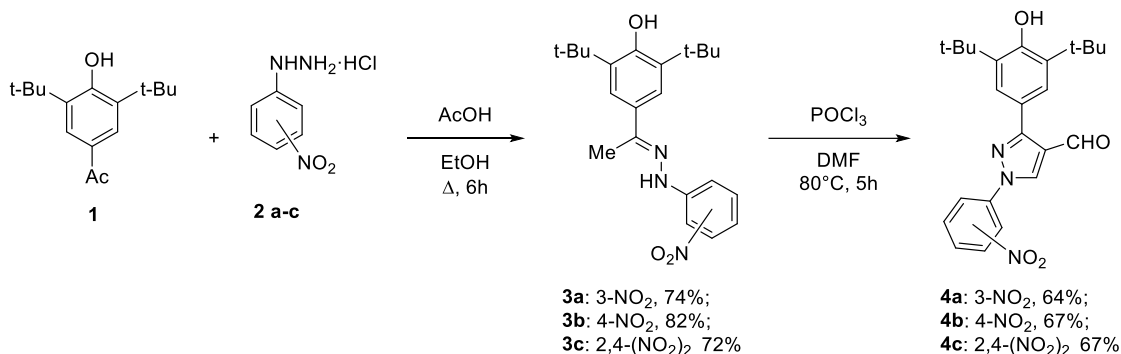
Сорокин А.В., Ильков К.В., Илькова А.А.

Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина, Москва, Россия.
e-mail: ilkov.k@gubkin.ru

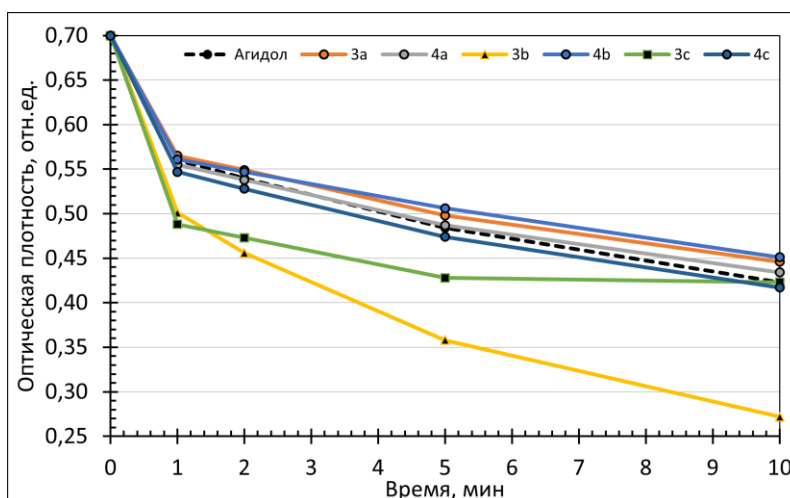
Пиразолы относятся к одному из наиболее важных классов гетероциклических систем, имеющих большое значение для медицинской химии. За последнее время синтезированы различные 4-функционально замещённые N-арилпиразолы, продемонстрировавшие выраженную биологическую активность [1].

В то же время важной задачей является ингибирование процессов окисления, вызываемых активными формами кислорода. Для этих целей обычно используют фенольные антиоксиданты. Широко распространены соединения с фрагментом 2,6-ди-*tert*-бутилфенола. Совмещение в одной структуре гетероцикла и пространственно-затруднённого фенола представляется интересной задачей [2].

В настоящей работе из 4-гидрокси-3,5-ди-*tert*-бутилацетофенона **1** и ряда арилгидразинов **2** с электроноакцепторной нитрогруппой были получены гидразоны **3a-c**. Использование других гидразинов не привело к ожидаемым продуктам. Полученные гидразоны **3** при нагревании в условиях Вильсмейера-Хаака [3] подвергались циклизации в соответствующие N-арил-3-(4-гидрокси-3,5-ди-*tert*-бутилфенил)-4-формил-1H-пиразолы **4a-c**.



Оценку антиокислительной активности проводили методами ABTS и PFRAP. Исследуемые гидразоны **3** и пиразолы **4** (10⁻⁴ М) проявляют активность, сравнимую с активностью распространенного Агидол-1. Выделяется соединение **3c**, которое значительно превосходит Агидол-1 в первые минуты, а также соединение **3b**, которое на протяжении всего эксперимента проявляет активность выше на 60–75%.



PFRAP-тест соединений **3,4** (10⁻⁴ М) показал высокую активность относительно Агидол-1. Пиразолы по активности сопоставимы с Агидол-1, в то время как гидразоны показали активность выше в 1,6 – 4,5 раза, наибольшую активность показало соединение **3b**.

Агидол	3a	3b	3c
	0,919	2,279	0,714
0,582	4a	4b	4c
	0,436	0,828	0,487

Соединения **4a-c** также исследованы с помощью дериватографии для оценки температурной стабильности.

Литература

1. Khan, M.F., Alam, M.M., Verma, G., Akhtar, W., Akhter, M., Shaquiquzzaman, M. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2016, **120**, 170.
2. Yehye, W. A., Rahman, N. A., Ariffin, A., Abd Hamid, S. B., Alhadi, A. A., Kadir, F. A., Yaeghoobi, M. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2015, **101**, 295-312.
3. Prakash, O., Pannu, K., Naithani, R., Kaur, H. *Synthetic communications*, 2006, **36(23)**, 3479.

СИНТЕЗ N-ЗАМЕЩЕННЫХ 2-(4,6-ДИ-ТРЕТ-БУТИЛ-2,3-ДИГИДРОКСИФЕНИЛ)-1H-БЕНЗО[d]ИМИДАЗОЛОВ

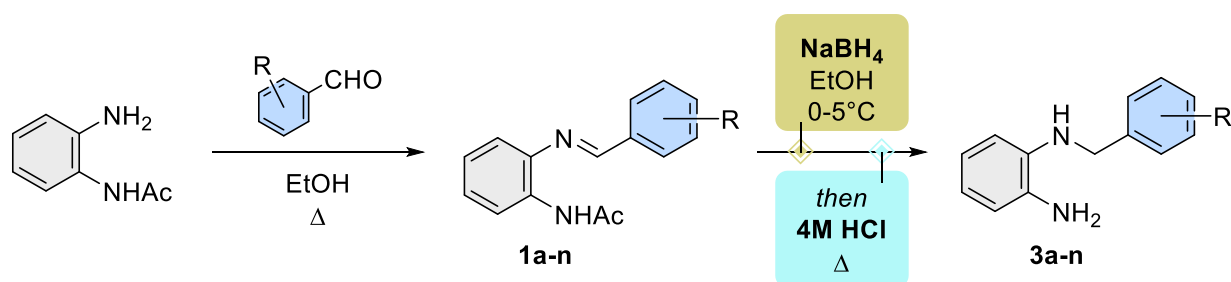
Илькова А.А., Ильков К.В., Кошелев В.Н.

Российский государственный университет нефти и газа
(национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина,
Москва, Россия.

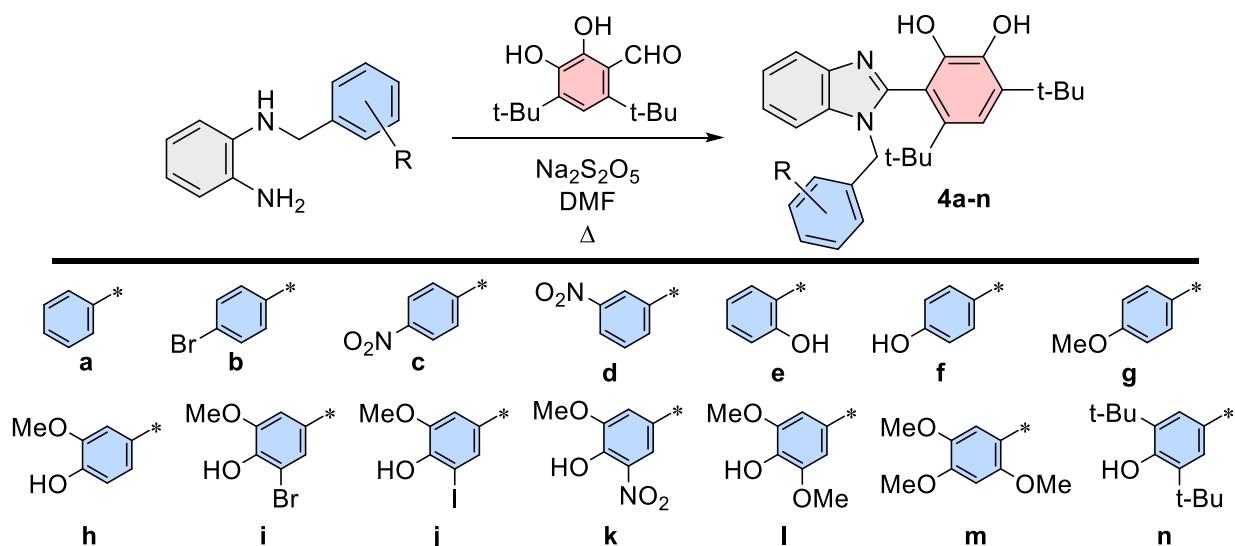
e-mail: ilkova.a@gubkin.ru

Бензимидазолы являются привилегированным классом биоактивных гетероциклических соединений, проявляющих широкий спектр биологической активности. Фрагменты бензимидазола присутствуют в антиоксидантных, противопаразитарных, антигельминтных средствах, противосудорожных, противовоспалительных и противоопухолевых препаратах [1].

В настоящей работе представлял интерес синтез N-замещенных 2-R-бензимидазолов, содержащих различные заместители в 1-ом и во 2-ом положениях, в том числе и фенольные. На первой стадии из различных бензальдегидов и N-(2-аминофенил)ацетида был получен ряд оснований Шиффа **1a-n** с выходами 50-93%. Использование N¹-Ас-фенилендиамин обуславливалось необходимостью избежать образование бис(азометинов). Полученные соединения восстанавливали NaBH₄ до N-(2-(бензиламино)фенил)ацетамидов **2a-n** (73-95%), продукты восстановления кипятили в 4М HCl для удаления ацильной группы (**3a-n**, 79-98%).



N¹-бензилзамещенные *o*-фенилендиамины вовлекали в окислительную циклизацию с 4,6-ди-*трет*-бутил-2,3-дигидроксибензальдегидом в присутствии пиросульфата натрия. Реакцию проводили в ДМФА в течение 5 ч. Таким образом была получена серия бензимидазолов **4a-n** с выходом 56-87%.



Литература

1. Aroua, L. M., Alminderej, F. M., Almuhaylan, H. R., Alosaimi, A. H., Medini, F., Mohammed, H. A., Almahmoud, S. A., Khan, R.A., Mekni, N. H. *RSC Advances*, 2025, **15**(10), 7571.

НАНОЧАСТИЦЫ ОРГАНИЧЕСКИХ СОПРЯЖЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ С ПОГЛОЩЕНИЕМ СВЕТА
В БИК ДИАПАЗОНЕ ДЛЯ ФОТОИНДУЦИРОВАННОЙ ТЕРАПИИ РАКА

Исаева Ю.А.^а, Благодарная Е.Д.^а, Шумицкая А.А.^б, Акасов Р.А.^в, Лупоносов Ю.Н.^а

^а *Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова, Москва, Россия;*

^б *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
факультет наук о материалах, Москва, Россия;*

^в *Московский педагогический государственный университет, Москва, Россия.
e-mail: yu.isaeva@ispm.ru*

Фототерапия представляет собой эффективный и неинвазивный метод лечения рака. Несмотря на активные исследования, разработка новых фотосенсибилизаторов (ФС) и совершенствование традиционных ФС остаются актуальными задачами. Современные ФС должны избирательно накапливаться в опухолевых клетках и обладать спектром возбуждения в диапазоне 700–1500 нм для более глубокого проникновения света в ткани. Органические донорно-акцепторные (Д-А) олигомеры и полимеры – одни из наиболее перспективных классов ФС, отвечающих этим требованиям [2]. Благодаря наличию в одной структуре электронодонорных и электроноакцепторных единиц, их фотофизические свойства могут настраиваться путем структурных модификаций для оптимизации поглощения света в красном и ближнем ИК диапазонах. Структура этих ФС также определяет их способность генерировать активные формы кислорода, фототермические характеристики и потенциал для биовизуализации. Создание водных дисперсий на их основе обеспечивает биосовместимость и адресную доставку за счёт оптимизации размера, заряда и функционализации поверхности наночастиц (НЧ). Исследования Д-А олигомеров и полимеров для биомедицинских приложений активно развиваются, однако многие аспекты их структурной оптимизации и корреляции между химической структурой и биологической активностью остаются недостаточно изученными.

В ходе исследования были получены НЧ на основе органического полупроводника IDIC и трех его полимерных производных. Средние гидродинамические диаметры НЧ варьировались от 35 до 63 нм, что соответствует оптимальному размеру для доставки в опухолевые ткани. Анализ спектров поглощения показал, что максимумы поглощения всех соединений находятся в диапазоне 640–750 нм, что позволяет использовать их в терапевтическом красном «окне». В ходе изучения зависимости жизнеспособности клеток рака молочной железы MCF-7 и нормальных клеток фибробластов WI-26 от концентрации НЧ при облучении (730 нм, 15 Дж/см²) и в темноте было установлено, что фототоксические индексы полимерных НЧ превышают таковые для НЧ IDIC в 5–7 раз, что свидетельствует об их потенциале как более эффективных ФС. Кроме того, в отношении раковых клеток MCF-7 наблюдалась более выраженная токсичность, чем для нормальных клеток WI-26. Была также исследована способность НЧ к фототермическому эффекту, построенные кривые нагрева подтвердили корреляцию между термическими свойствами и цитотоксичностью. Полученные результаты открывают перспективы для дальнейшей разработки сопряженных полимерных ФС данной структуры для биомедицинских приложений.

Литература

1. Correia J. H., Rodrigues J. A., Pimenta S., Dong T., Yang Z. *Pharmaceutics*. 2021, **13**, 332.
2. Lee K. W., Wan Y., Huang Z., Zhao Q., Li S., Lee C. S. *Adv. Materials*. 2024, **36**, 2306492.
3. Lu B., Huang Y., Zhang Z., Quan H., Yao Y. *Materials Chemistry Frontiers*. 2022, **6**, 2968–2993.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и образования Российской Федерации (ГЗ № FFSM-2024-0003)

БИОДОСТУПНЫЕ ИНГИБИТОРЫ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ТУБУЛИНА РЯДА ИЗОКСАЗОЛА С ПРОТИВООПУХОЛЕВЫМ ДЕЙСТВИЕМ

Каретников Г.Л., Гук Д.А., Воробьева М.А., Скворцов Д.А., Бондаренко О.Б.

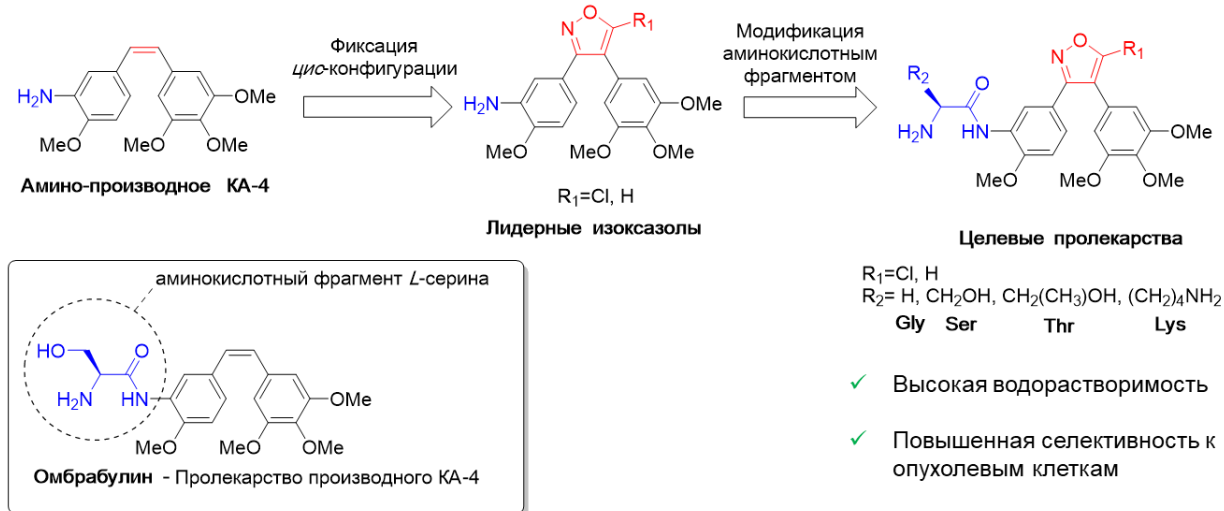
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.

e-mail: geokaret@yandex.ru

В последние годы все больше исследований направлено на поиск противоопухолевых препаратов в связи с актуальностью проблемы онкологических заболеваний. Только в 2022 году в мире было выявлено более 20 млн онкологических заболеваний, более 10 млн которых привели к летальному исходу. Одним из перспективных противоопухолевых агентов, исследования которого ведутся уже более 20 лет является *цис*-стильбеноид Комбретастатин А4 (КА-4), механизм действия которого основан на ингибировании полимеризации тубулина в клетке. Однако в клинической практике сам КА-4 не используется вследствие плохой биодоступности и низкого барьера изомеризации активной *цис*- в неактивную *транс*-форму.[1]

Актуальным направлением является решение конфигурационной проблемы КА-4 путем фиксации *цис*-формы гетероциклическим фрагментом, в частности, изоксазольным. При этом введение дополнительного аминокислотного фрагмента в молекулу позволяет существенно повысить водорастворимость и биодоступность соединений в биологических системах.[2]

На основе ранее предложенных нашей научной группой лидерных соединений [3], нами разработан подход к пролекарствам аналогов КА-4 ряда изоксазола, проведена оценка их водорастворимости и изучена биологическая активность *in vitro* на избранных клеточных линиях.



Литература

1. Karatoprak G.Ş. et al. *Molecules*. — 2020. Vol. 25, № 11. — P. 2560.
2. Devkota L. et al. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. — 2016. Vol. 24, № 5. — P. 938–956.
3. Karetnikov G.L. et al. *ACS Pharmacology & Translational Science*. — 2024. Vol. 7, № 2. — P. 384–394.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-73-00033).

НУКЛЕОФИЛ-ИНДУЦИРОВАННОЕ РАСКРЫТИЕ ТИАЗОЛОПИРИМИДИНОВОГО ЦИКЛА: НОВЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ НАПРАВЛЕННОГО СИНТЕЗА МОДИФИЦИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Кожихов А.А.^а, Агарков А.С.^а, Галузо И.А.^б, Габитова Э.Р.^{а,б}, Мингажетдинова Д.О.^б,
Нефедова А.А.^а, Французова Л.В.^а, Лодочникова О.А.^а, Соловьева С.Е.^а, Антипин И.С.^б**

^аИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова,
ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия.

^бФедеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Казанский
(Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия.
e-mail: andreykozhikhov2000@gmail.com

Тиазоло[3,2-а]пиримидиновые производные представляют собой перспективную синтетическую платформу и важный класс соединений в области фармацевтической химии [1]. Тем не менее, данных о модификациях таких структур в литературе известно мало [2].

В то же время концепция "молекулярного редактирования" получила значительное внимание ввиду возможности непосредственной и целенаправленной модификации субстратного каркаса. Данный подход привносит способность изменять молекулярное ядро посредством взаимных преобразований (гетеро)ароматических структур (особенно распространенных в биологически активных соединениях [3]) и, тем самым, открывает новые перспективы для создания уникальных молекул с заданными свойствами и функциональностью [4].

В рамках данной работы рассматривается новый подход к молекулярному редактированию производных тиазоло[3,2-а]пиримидина, заключающийся в мультиатомном скелетном редактировании путем введения O- [5,6], N- и S-содержащих фрагментов в гетероциклический остов (Схема 1).

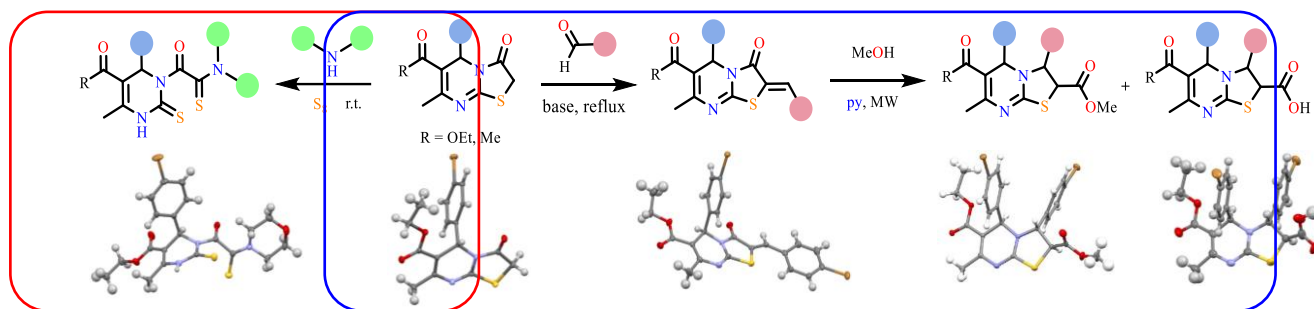


Схема 1.

Литература

1. A. Keshari, A. Singh, S. Saha *Mini Rev Med Chem.*, 2017, **17**(15), 1488-1499.
2. H.M. Nagarajaiah, I.A. Khazi, N.S. Begum *J. Chem. Sci.*, 2015, **127**(3), 467-479.
3. B.W. Joynson, L.T. Ball *Helv. Chim. Acta.*, 2023, **106**, e202200182.
4. K.R. Campos, P.J. Coleman, J.C. Alvarez, S.D. Dreher, R.M. Garbaccio, N.K. Terrett, R.D. Tillyer, M.D. Truppo, E.R. Parmee *Science*, 2019, **363**(6424), eaat0805.
5. A.A. Kozhikhov, A.S. Agarkov, M. Mailyan, L.V. Frantsuzova, O.A. Lodochnikova, S.E. Solovieva, I.S. Antipin *J. Struct. Chem.*, 2025, **66**(5), 911-920.
6. A.S. Agarkov, A.A. Kozhikhov, A.A. Nefedova, A.S. Ovsyannikov, D.R. Islamov, S.E. Solovieva, I.S. Antipin *Dokl. Chem.*, 2022, **505**(2), 177-183.

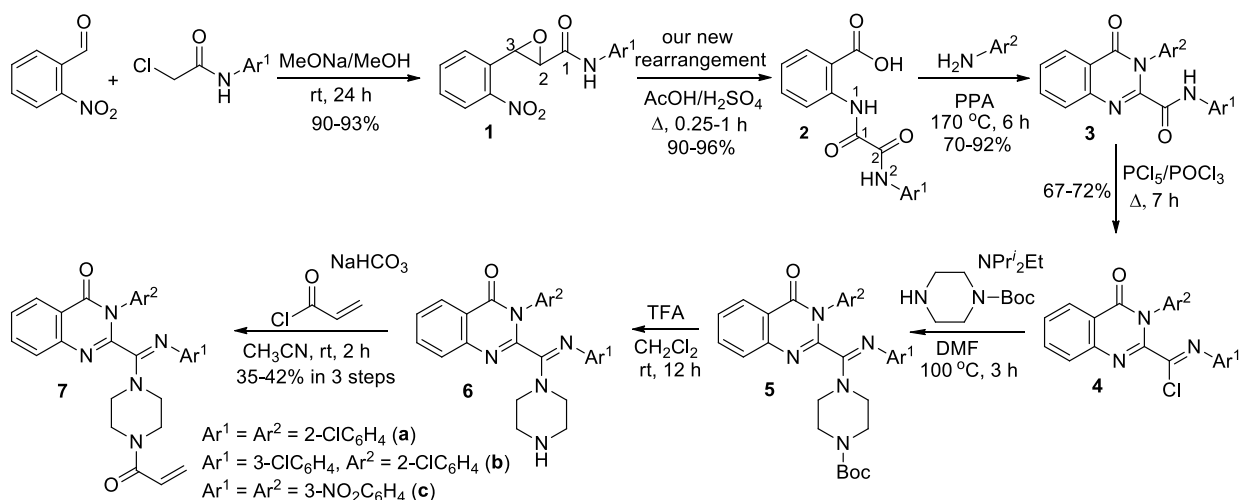
**РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ СИНТЕЗА
2-((4-АКРИЛОПИПЕРАЗИН-1-ИЛ)(АРИЛАМИНО)МЕТИЛ)-3-АРИЛХИНАЗОЛИН-4-ОНОВ –
ПЕРСПЕКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В ПОИСКЕ ИНГИБИТОРОВ KRAS^{G12C} ОНКОГЕНОВ**

**Коршин Д.Э., Мамедова В.Л., Кушатов Т.А., Тихомирова Н.А.,
Губайдуллин А.Т., Синяшин О.Г., Мамедов В.А.**

*Институт органической и физической химии имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН,
лаборатория химии гетероциклических соединений, Казань, Россия.
e-mail: dmitribned@mail.ru*

Мутации, в протоонкогене KRAS (и соответственно в белке K-Ras, регулирующем клеточную пролиферацию/дифференцировку) приводят к 20% случаев рака у человека. Наиболее распространённой мутацией K-RAS является мутация цистеина в 12 кодоне (KRAS^{G12C}), вызывающая немелкоклеточный рак лёгкого. Противораковые препараты *соторасиб* и *адгарасиб*, зарегистрированные FDA в качестве разрешённых к применению лекарственных средств в 2021 и 2022 годах соответственно, выполняют роль ингибиторов KRAS^{G12C}. Связывающим цистеиновый остаток в KRAS^{G12C} элементом в большинстве известных на данный момент соединений с ингибирующей KRAS^{G12C} активностью является пиперазинакриламидный фрагмент, а основу этих соединений часто составляют хиназолин и его производные [1].

Ранее нами был разработан эффективный способ синтеза 2-карбоксанилидо-3-арилхиназолин-4-онов (1) [2], которые в данной работе были использованы в качестве исходных соединений на пути к целевым 2-((4-акрилопиперазин-1-ил)(арилимино)метил)-3-арилхиназолин-4-онам – перспективным соединениям в поиске ингибиторов KRAS^{G12C}.



Литература

1. X. Ma, D.L. Sloman, R. Duggal, K.D. Anderson, J.E. Ballard, I. Bharathan, C. Brynczka, S. Gathiaka, T.J. Henderson, T.W. Lyons, R. Miller, E.V. Munsell, P. Orth, R.D. Otte, A. Palani, D.A. Rankic, M.R. Robinson, A.C. Sather, N. Solban, X.S. Song, X. Wen, Z. Xu, Y. Yang, R. Yang, P.J. Day, A. Stoeck, D.J. Bennett, Y. Han. *J. Med. Chem.*, 2024, **67**, 11024.
2. V.A. Mamedov, V.L. Mamedova, A.D. Voloshina, T.A. Kushatov, V.V. Syakaev, S.K. Latypov, A.T. Gubaidullin, D.E. Korshin, D.N. Buzyurova, I.Kh. Rizvanov, O.G. Synyashin. *Tetrahedron Lett.*, 2019, **60**, 151205.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФ (грант 24-13-00098).
Физико-химические исследования проведены в ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН.*

РЕАКЦИИ СЕЛЕКТИВНОГО ОКИСЛЕНИЯ ДИГИДРОДИТИИНОФУРАНОНОВ

**Латыпова Л.З.^а, Сайгитбаталова Е.Ш.^а, Хабибрахманова А.М.^а, Лодочникова О.А.^б,
Новикова Ю.В.^а, Чмутова Г.А.^а, Курбангалиева А.Р.^а**

^аКазанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казань, Россия.

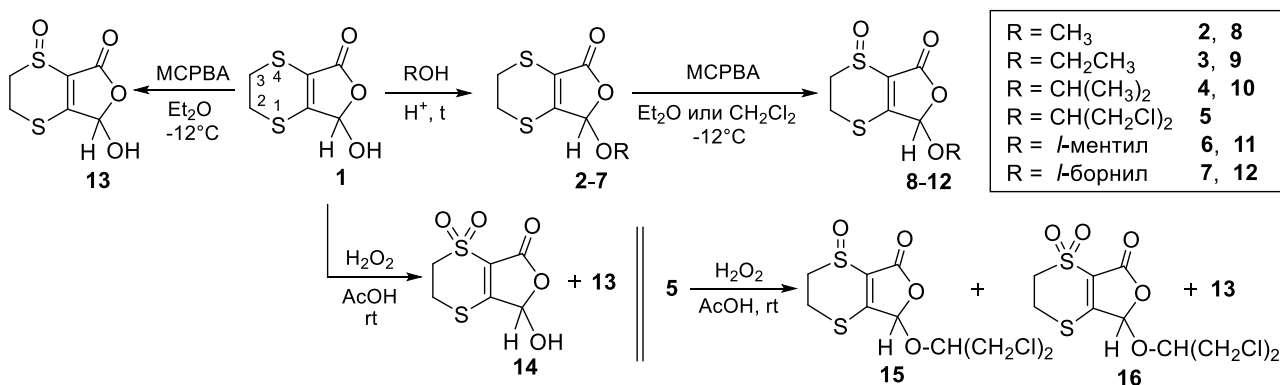
^бИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова –
ОСП ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия.

e-mail: llatypov@kpfu.ru

Гетероциклы ряда 2(5H)-фуранона вызывают интерес исследователей на протяжении многих лет, что связано с их высокой и разноплановой реакционной способностью, позволяющей использовать фураноны в качестве структурного звена в органическом синтезе, в частности, для получения биологически активных соединений. В данной работе представлен метод синтеза бициклических конденсированных гетероциклов, содержащих фрагменты 1,4-дитиана и 5-алкокси-2(5H)-фуранона, в том числе оптически активных. С целью получения моносulьфоксидов и моносulьфонов исследованы реакции окисления дитиинофуранонов различными реагентами.

Гетероцикл **1** синтезирован из мукохлорной кислоты и этан-1,2-дитиола по литературной методике [1]. Далее в 7 положение молекулы соединения **1** в условиях кислотного катализа введены фрагменты алифатических и монотерпеновых спиртов. В случае оптически активных *l*-ментола и *l*-борнеола выделены индивидуальные стереоизомеры бициклов **6** ((*R*)-конфигурация атома C⁷) и **7** ((*S*)-конфигурация). На следующем этапе при действии на бициклы **2–7** эквимолярного количества *m*-хлорнадбензойной кислоты (MCPBA) при температуре –12°C в Et₂O или CH₂Cl₂ в качестве основных продуктов получены соответствующие моносulьфоксиды **8–12** с сулфинильной группой у атома серы S⁴. В индивидуальном виде выделены оптически активные моносulьфоксиды **11** ((*S,R*)- и (*R,S*)-изомеры) и **12** ((*S,R*)-изомер). При использовании в качестве окислителя избытка H₂O₂ образовались моносulьфоны **14** и **16** в смеси с соответствующими моносulьфоксидами. Молекулярная и кристаллическая структура новых гетероциклов **8–16** охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа.

С помощью квантово-химических расчетов на уровне B3LYP/6-31++G(d,p) и анализа их результатов в рамках QTAIM Бейдера объяснена высокая региоселективность процесса окисления атома серы S⁴.



Литература

1. A. R. Kurbangaliev, O. A. Lodochnikova, N. F. Devyatova, E. A. Berdnikov, O. I. Gnezdilov, I. A. Litvinov, G. A. Chmutova *Tetrahedron*, 2010, **66**, 9945.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-73-10182).

СИНТЕЗ ТРИХЛОРМЕТИЛСОДЕРЖАЩИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ НИТРОДИГИДРОФУРОПИРАНОНОВ

Пилипенко И.А.^{а,б}, Озерова О.Ю.^а, Васильев А.В.^б, Макаренко С.В.^а

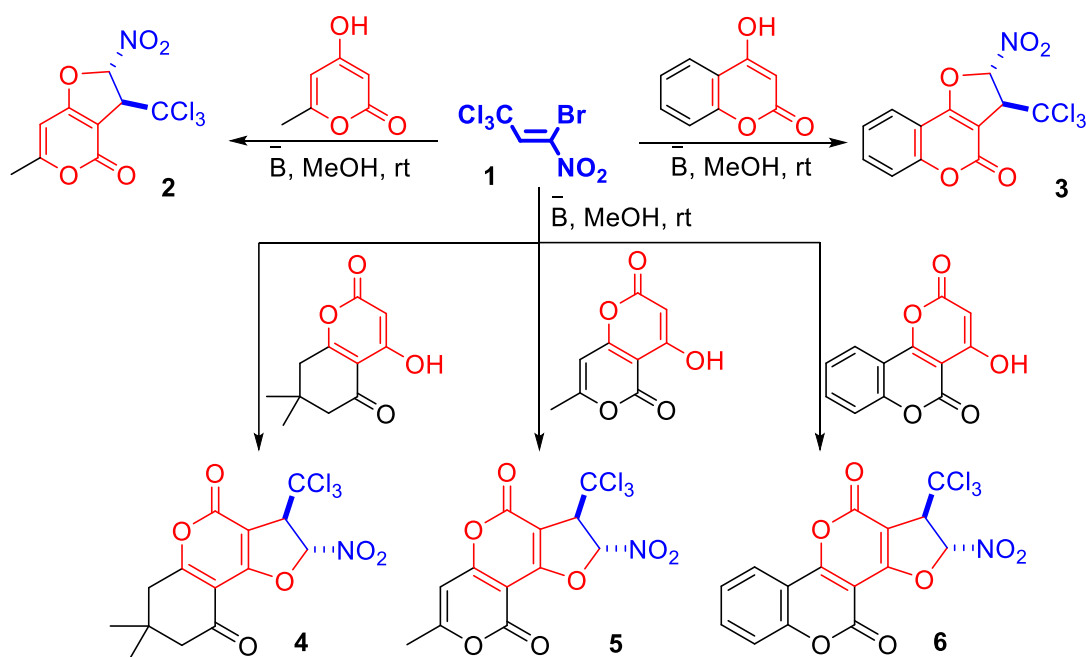
^а *Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия.*

^б *Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет им. С. М. Кирова, Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: kohrgpu@yandex.ru*

Известно, что трихлорметилсодержащие соединения являются востребованными субстратами при получении практически значимых веществ. В тоже время, соединения с CCl_3 -группой являются метаболитами цианобактерий и обладают полезными биологически активными свойствами [1].

Ранее на основе реакций трихлорметилсодержащего представителя *гем*-бромнитроэтанов – 1-бром-1-нитро-3,3,3-трихлорпропена [2] – с ацетилацетоном, дигидрорезорцином и димедоном получены первые представители трихлорметилсодержащих нитродигидрофуранов с невысокими выходами [3].

Изученное нами взаимодействие 1-бром-1-нитро-3,3,3-трихлорпропена **1** в реакциях с представителями гетероциклических енолизирующихся СН-кислот, содержащих пирановый фрагмент, протекающих в присутствии основания (K_2CO_3 или AsOK) в растворе безводного метанола, позволило получить оригинальные представители нитросодержащих дигидрофуропиранонов **2-6**.



Строение полученных гетероциклов **2-6** установлено на основании данных спектроскопии ЯМР ^1H , ^{13}C , в том числе 2D экспериментов.

Литература

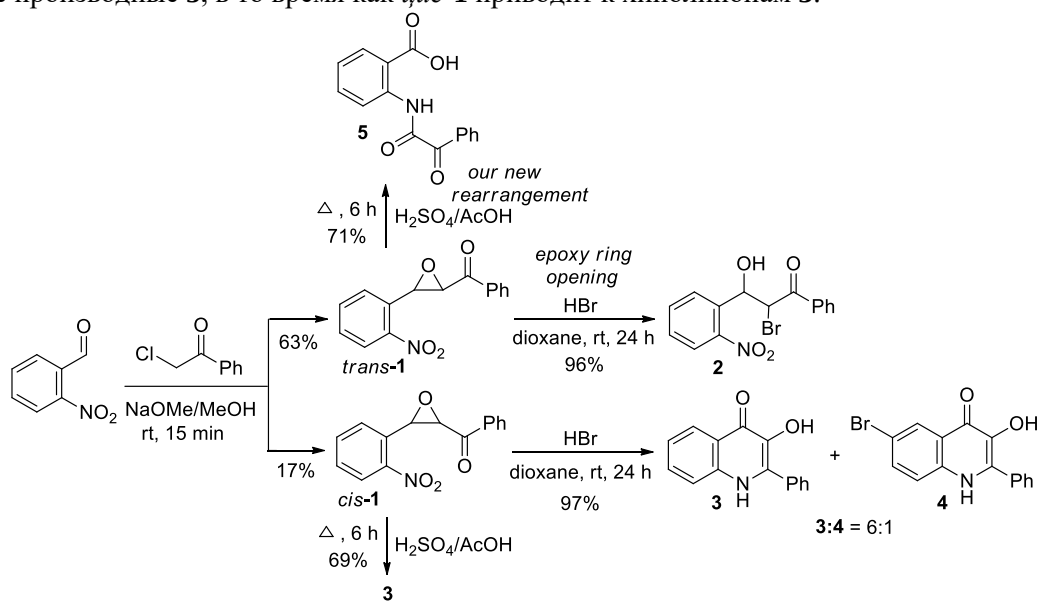
1. M. D. Sadar et al. *Org. Lett.* 2008, **10**, 4947.
2. J. A. Durden, Jr., D. L. Heywood, A. A. Sousa, H. W. Spurr *J. Agr. Food Chem.*, 1970, **18**, 50.
3. С. В. Макаренко, Е. В. Стукань, Е. В. Трухин, В. М. Берестовицкая *ЖОХ.*, 2015, **85**, 1659.

Работа выполнена в рамках внутреннего гранта РГПУ им. А.И. Герцена (проект №51-ВГ).

РАЗЛИЧНАЯ РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ЦИС И ТРАНС ИЗОМЕРОВ
3-АРИЛОКСИРАНИЛКАРБОНИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙМамедова В.Л.^a, Мамедова С.В.^b, Губайдуллин А.Т.^a,
Гаврилова Е.Л.^b, Сияшин О.Г.^b, Мамедов В.А.^a^aИнститут органической и физической химии имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, лаборатория химии
гетероциклических соединений, Казань, Россия.^bКазанский национальный исследовательский технологический университет,
кафедра органической химии, Казань, Россия.e-mail: mamedova@iopc.ru

Существует несколько методов синтеза оксиранилкарбонильных соединений без использования металлокатализаторов и сложных хиральных органокатализаторов (реакции Дарзана, Бюхнера-Курциуса-Шлоттербека, Уэйтса-Шеффера, Кори-Чайковского-Джонсона, Джулии-Колонны, Кухтина-Рамиреза), с использованием которых, как правило, получают *транс*-изомеры оксиранов, химические свойства которых исследованы достаточно подробно [1]. Здесь мы представляем отличную от *транс*-изомеров реакционную способность *цис*-изомеров 3-арилоксиранилкарбонильных соединений.

В реакции *транс*-(3-(2-орто-нитрофенил)оксиран-2-ил)(фенил)метанона (*транс*-1) с бромистоводородной кислотой получен продукт раскрытия эпоксидного кольца 2, в то время как *цис*-1 в этих условиях превращается в хинолины 3 и 4. Под действием H₂SO₄ в AcOH *транс*-1 перегруппировывается в оксаламидные производные 5, в то время как *цис*-1 приводит к хинолинам 3.



Различное поведение *цис* и *транс* изомеров ментил-3-арилглицидатов описано нами ранее [2].

Литература

1. В.Л. Мамедова, Г.З. Хикматова, Д.Э. Коршин, С.В. Мамедова, Е.Л. Гаврилова, В.А. Мамедов *Успехи химии*, 2022, **91**, RCR5049.
3. V.A. Mamedov, V.L. Mamedova, V.V.Syakaev, T.A.Kushatov, S.V. Mamedova, D.E. Korshin, A.I. Samigullina, J.K. Voronina, E.S. Kobeleva, A.T. Gubaidullin, E.L. Gavrilova, O.G. Sinyashin *Tetrahedron*, 2024, **167**, 134244.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФ (грант 24-13-00098).

Физико-химические исследования проведены в ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН.

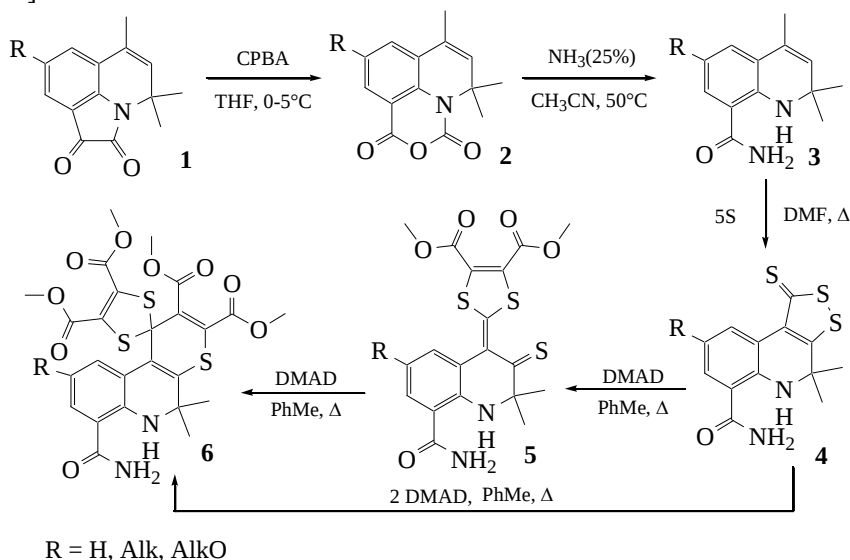
КАРБАМОИЛСОДЕРЖАЩИЕ 1,2-ДИТИОЛО[3,4-с]ХИНОЛИН-1-ТИОНЫ: СИНТЕЗ И ПРЕВРАЩЕНИЯ

Медведева С.М., Мовчан А.В., Шихалиев Х.С.

Воронежский государственный университет,
химический факультет, Воронеж, Россия.e-mail: SMMedvedeva@rambler.ru

В последние годы нами обнаружена множественная активность (противомикробная, противогрибковая, противовоспалительная, противораковая и противовирусная) замещенных 1,2-дитиоло[3,4-с]хинолин-1-тионов, в связи с этим, представляет интерес получение новых производных этих трициклических систем [1-4].

Удобными субстратами для введения функциональных групп в ароматический цикл хинолина являются синтезированные нами, окислением пирроло[3,2,1-ij]-хинолин-1,2-дионов **1** *m*-хлорнадбензойной кислотой, 1,3-оксазино[5,4,3-ij]хинолин-1,3-дионы **2** [5]. Действием водного аммиака на последние нами получены дигидрохинолин-8-карбоксамиды **3**, далее проведено их осернение, приводящее к 1-тиоксо-4,5-дигидро-1H-[1,2]дитиоло[3,4-с]хинолин-6-карбоксамидам **4**, для которых проведены реакции [3+2]-диполярного циклоприсоединения и последующего диенового синтеза с образованием замещенных 2-(8-карбамоил-6-тиоксо-2,3-дигидрохинолин-4(1H)-илиден)-1,3-дитиолов **5** и 7'-(карбамоил)-спиро[1,3-дитиоло-2,1'-тиопирано[2,3-с]хинолин]ов **6**.

**Литература**

1. V. Kartsev, Kh.S. Shikhaliev, A. Geronikaki, S.M. Medvedeva, I.V. Ledenyova, M.Y. Krysin, A. Petrou, A. Ciric, J. Glamoclija, M. Sokovic *Eur. J. Med. Chem.*, 2019, **175**, 201.
2. S.M. Medvedeva, Kh.S. Shikhaliev, A.A. Geronikaki, P.I. Savosina, D.S. Druzhilovskiy, V. Poroikov *SAR QSAR Environ. Res.*, 2022, **4**, 273.
3. S.M. Medvedeva, Kh.S. Shikhaliev. *Molecules*, 2022, **13**, 4033.
4. A. Sulimov, I. Ilin, D. Kutov, Kh. Shikhaliev, D. Shcherbakov, O. Pyankov, N. Stolpovskaya, S. Medvedeva, V. Sulimov. *Molecules*, 2022, **17**, 5732.
5. S.M. Medvedeva, A.V. Movchan, O.E. Sidorenko, A.S. Shestakov, I.V. Ledenyova, I.V. Zavarzin, Kh.S. Shikhaliev *ARKIVOC*, 2022, *ii*, 215.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2023-2025 годы, проект № FZGU-2023-0009.

ПОИСК НОВЫХ АВТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ТРИАЗОЛА

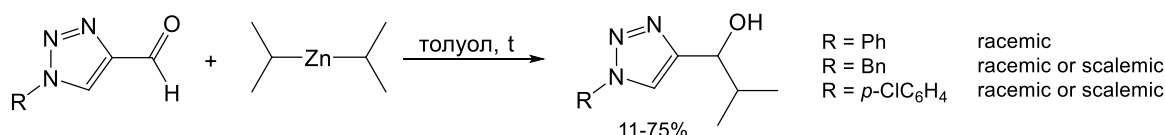
Михайлов О.А., Гриднев И.Д.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, 119991,

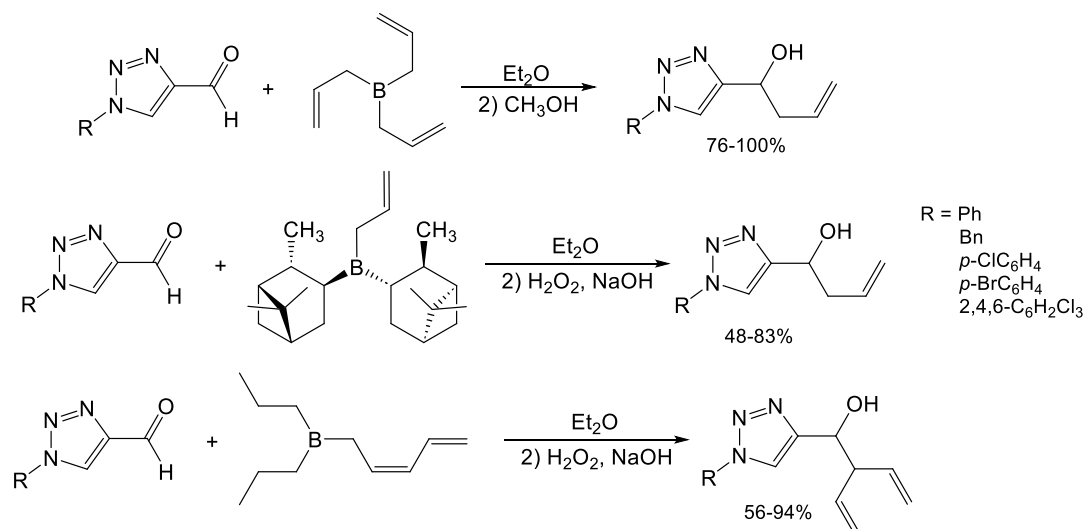
Российская Федерация, Москва, Ленинский проспект, 47

E-mail: mikhaylov.o@ioc.ac.ru

В процессе изучения реакции Соаи было исследовано алкилирование структурно похожих гетероциклов – производных 1,2,3-триазола. В ряде случаев при их взаимодействии с диизопропилцинком наблюдалась спонтанная генерация хиральности [1].



При использовании других алкилирующих реагентов круг изучаемых субстратов был расширен аллильными производными триазола. Также зафиксировано единичное образование нерацемического продукта в реакции триаллилборана и *p*-ClC₆H₄-альдегида [2,3].



Литература

1. O.A. Mikhaylov, E.S. Saigitbatalova, L.Z. Latypova, A.R. Kurbangalieva, I.D. Gridnev, *Symmetry*, 2023, **15**, 1382.
2. O.A. Mikhailov, M.E. Gurskii, A.R. Kurbangalieva, I.D. Gridnev, *Int. J. Mol. Sci.* 2024, **25**, 11273.
3. O.A. Mikhailov, E.S. Saigitbatalova, L.Z. Latypova, D.P. Gerasimova, O.A. Lodochnikova, A.R. Kurbangalieva, I.D. Gridnev, *Russ. Chem. Bull.* 2024, **73**, 2910–2920.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00275-П).

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ ПОЛУЧЕНИЯ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ФРАГМЕНТОМ ФЕНОЛА НА ОСНОВЕ ЦИАНОАЦЕТАМИДА

Муминов Р.Ш., Снастина О.В., Кошелев В.Н.

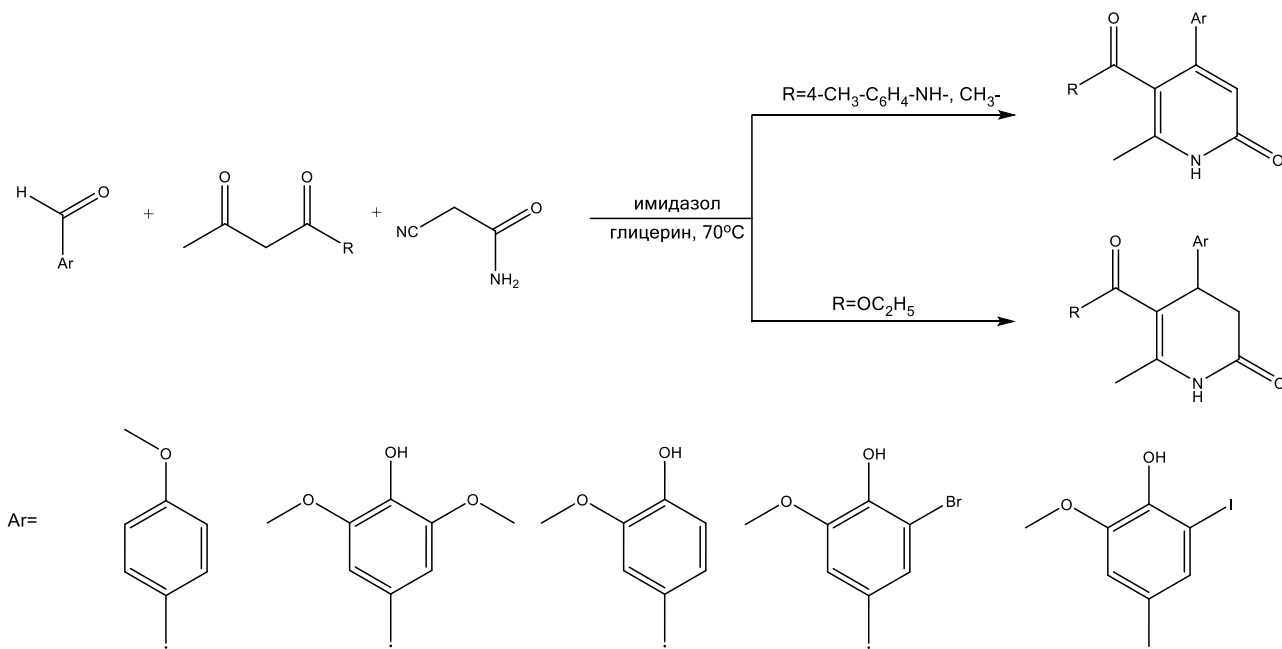
Российский государственный университет нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина,
Москва, Россия.e-mail: rmuminov23@gmail.com

Цианоацетамид является прекурсором для синтеза широкого ряда гетероциклических структур [1]. Так, одним из возможных направлений синтеза на основе цианоацетамида является получение производных пиридоны-2, которые обладают широким спектром биологической активности, а также антиоксидантными свойствами [2].

Также известно, что фенолы обладают высокой антиокислительной активностью. При проведении синтеза с получением пиридонов, содержащих фрагмент фенола, можно добиться уникального сочетания свойств.

В настоящей работе изучена трехкомпонентная реакция взаимодействия цианоацетамида, 1,3-дикарбонильного соединения (ацетилацетон, ацетоуксусный эфир, толиламид ацетоуксусной кислоты) и ароматического альдегида. Реакция проводится в глицерине при 70°C в присутствии имидазола в качестве катализатора.

Производные пиридоны-2 образуются в случае использования в качестве 1,3-дикарбонильных соединений ацетилацетона и толиламида ацетоуксусной кислоты. Выход составляет 52-92%. В случае же использования в качестве 1,3-дикарбонильного соединения ацетоуксусного эфира происходит образование соединения с фрагментом 3,4-дигидропиридоны-2 с выходом 50-62%.

**Литература**

1. K. K. Verma, S. Kapoor, V. K. Kushwaha, A. Mishra, A. Upadhyay *Letters in Drug Design & Discovery*, 2024, **21(10)**, 1617-1631.
2. M. Kamali, S. Shahi, M. Mashhadi Akbar Bujar. *ChemistrySelect*, 2020, **5(5)**, 1709-1712.

С–Н-ИМИДИРОВАНИЕ 2H-ИМИДАЗОЛ-N-ОКСИДОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ NFSI В УСЛОВИЯХ МЕДНОГО КАТАЛИЗА

**Нелюбина А.А.,^а Акулов А.А.,^а Евтушенко А.С.,^а Вараксин М.В.,^{а,б}
Чарушин В.Н.,^{а,б} Чупахин О.Н.^{а,б}**

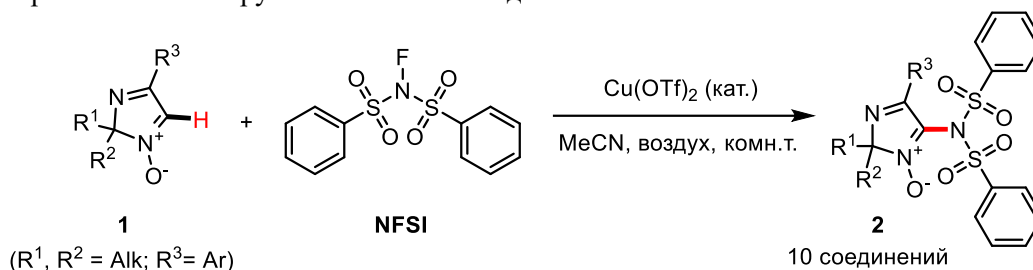
^а Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, 620062, Екатеринбург, Мира, 19.

^б Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, 620137, Екатеринбург, С. Ковалевской 22.

E-mail: anna.nelubina@urfu.ru

Циклические нитроны представляют интерес благодаря их синтетической универсальности и фармакологической активности. В частности, ранее было показано, что такие представители данного класса соединений, как производные 2H-имидазол-1-оксида, содержащие морфолиновый заместитель при положении C5 имидазольного цикла, способны проявлять выраженную эндотелиопротекторную активность, снижая уровень артериального давления в левом желудочке сердца у мышей [1]. При этом удобным, но ограниченно изученным способом структурной модификации, приводящим к получению молекул такого рода, является прямая C(sp²)–H-функционализация азометинового фрагмента в соответствующих альдонитронных субстратах **1**. [2] В связи с этим разработка синтетических подходов к функционализации 2H-имидазол-N-оксидов **1** другими азот-центрированными синтонами представляется особо актуальным.

Настоящая работа посвящена исследованию прямого C(sp²)–H-имидирования 2H-имидазол-N-оксидов **1** при использовании N-фторбензолсульфонимида (NFSI), выступающего в качестве источника атома азота для образования новой связи C(sp²)–N. Было установлено, что такие реакции могут быть реализованы с использованием трифлата меди(II) в качестве катализатора, при этом в качестве наиболее эффективного растворителя был выбран ацетонитрил. В результате был получен ряд из 10 новых соединений **2** с умеренными выходами. Несмотря на ограниченную продуктивность, преимуществом подхода является относительная простота выделения целевых веществ. Структура синтезированных соединений была подтверждена современными инструментальными методами анализа.



В настоящее время нами проводятся дальнейшие исследования по определению механизма, рассматриваемого кросс-сочетания, а также проводится первичная оценка биологической активности полученных (сульфонимид)содержащих гетероциклических соединений **2**.

Литература

1. А. А. Болгов, О. А. Пученкова, Д. А. Костина, Экспериментальная и клиническая фармакология, 2024, **87** (10), 31.
2. А. А. Akulov, M. V. Varaksin, A. A. Nelyubina, The Journal of Organic Chemistry, 2024, **89** (1), 463.

СИНТЕЗ ПОЛИГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ ФОСФОРДИАМИДОВ

Немытов А.И.^а, Утепова И.А.^{а,б}, Егин С.В.^а, Чупахин О.Н.^{а,б}^аУральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, химико-технологический институт, Екатеринбург, Россия.e-mail: a.i.nemytov@urfu.ru^бФедеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского, УрО РАН, Екатеринбург, Россия.

Известно, что фосфорсодержащие препараты относятся к важному классу терапевтических средств и широко применяются в повседневной клинической практике. Циклофосфамид является фосфордиамидным цитостатиком, который давно зарекомендовал себя при лечении опухолей. Несмотря на значительную активность против опухолевых клеток, образующийся в результате метаболизма акролеин считается главным источником побочного действия препарата. Различные модификации оксазафосфоринового цикла по углероду, азоту и фосфору позволили обнаружить новые активные цитостатики – ифосфамид, трофосфамид, мафосфамид.

Ранее было продемонстрировано, что 1,3-дiazины подвержены реакциям с 2-нафтолами в присутствии кислот Бренстеда, образующийся при этом (гетеро)биарил способен координировать соединения бора с выделением хелатных оксазаборининов.

В настоящем исследовании был разработан синтетический подход к получению новых оксоазафосфоридамов, аналогов циклофосфамида, при взаимодействии дихлорфосфамида и производного тетрагидрохиназолина (Схема 1).

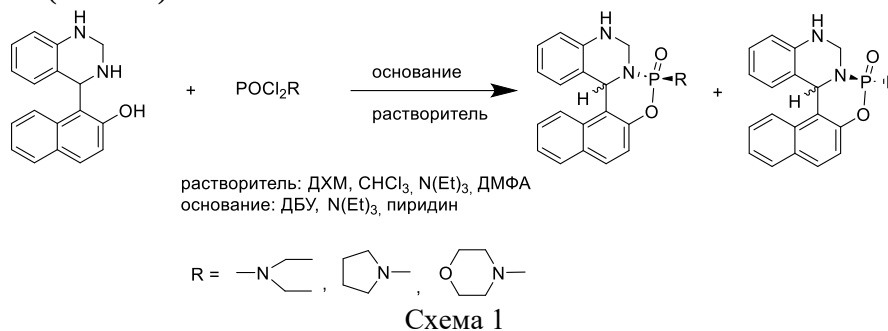


Схема 1

Оксоазафосфоридамы образуются в виде смеси двух стереоизомеров, структуры которых подтверждены комплексом физико-химических методов анализа. Полученные соединения являются перспективными для исследования их противоопухолевой активности.

С-Н/С-Н СОЧЕТАНИЯ 2H-ИМИДАЗОЛ 1-ОКСИДОВ С КЕТОНАМИ: НОВЫЙ ПОДХОД К МОДИФИКАЦИИ АЗАГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Никифоров Е.А.^а, Останин И.В.^а, Мосеев Т.Д.^а,
Вараксин М.В.^{а,б}, Чарушин В.Н.^{а,б}, Чупахин О.Н.^{а,б}**

^аУральский федеральный университет,
620062, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19

^бИнститут органического синтеза УрО РАН,
620066, Россия г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22
e-mail: m.v.varaksin@urfu.ru

Одной из ключевых задач современной органической химии является разработка новых и усовершенствование существующих методов синтеза азагетероциклических соединений, перспективных для применения в качестве фармакофорных соединений и функциональных материалов. В частности, производные имидазола представляют повышенный интерес, находя широкое применение в медицинской химии и фармакологии. Эти соединения являются структурными фрагментами многих лекарственных средств, обладающих разнообразной биологической активностью и используемых для лечения широкого спектра заболеваний, что обуславливает актуальность разработки эффективных методов их получения.

Методология С-Н функционализации, в частности, реакции нуклеофильного замещения водорода (S_N^H), представляет собой современный и эффективный подход к модификации гетероциклических соединений, позволяющий рассматривать не активированные С-Н связи в качестве функциональных групп, способных к образованию новых С-С связей. В рамках данного подхода нами была исследована возможность применения данного синтетического приема для модификации 2H-имидазол 1-оксидов С-Н кислотными субстратами, в том числе кетонами. Результатом работы стал синтез 14 новых соединений с выходами, достигающими 98% (Схема 1), что демонстрирует высокий потенциал предложенной методологии.

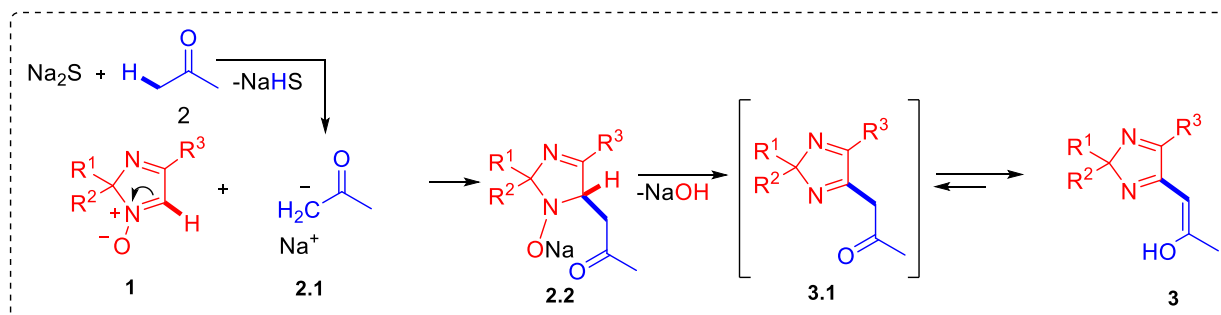
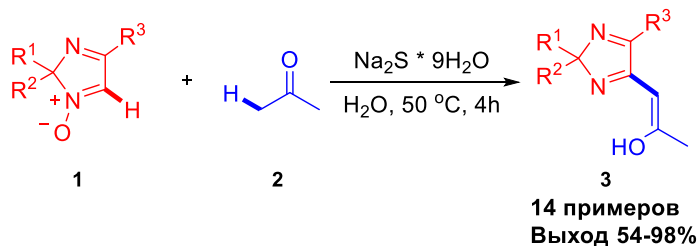


Схема 1 – С-Н функционализация 2H-имидазол 1-оксидов ацетоном

Дальнейшие исследования в данной области будут направлены на расширение границ применения разработанного подхода к другим азол- и азин N-оксидам. Также планируется определение возможности использования других С-Н кислотных соединений в данных превращениях, что позволит расширить спектр доступных структур и открыть новые перспективы в синтезе гетероциклических соединений с заданными свойствами.

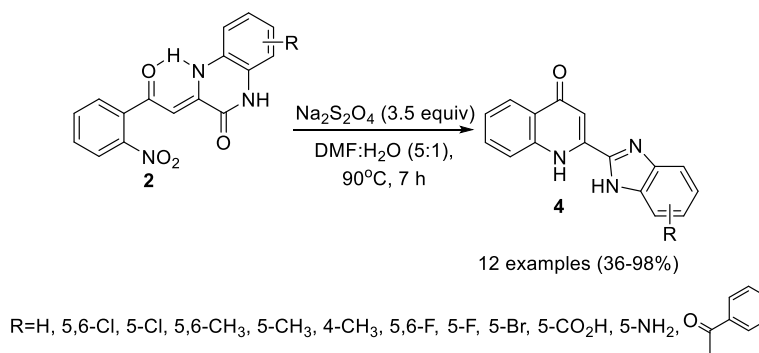
**Na₂S₂O₄ ИНИЦИИРУЕМАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА 3-(2-(2-НИТРОФЕНИЛ)-2-ОКСОЭТИЛ)ХИНОКСАЛИН-2(1H)-ОНОВ
В СИНТЕЗЕ 2-ГЕТЕРОАРИЛ-4-ХИНОЛОНОВ**

**Николаева Д.В., Галимуллина В.Р., Сякаев В.В., Губайдуллин А.Т.,
Ризванов И.Х., Синяшин О.Г., Мамедов В.А.**

*Институт органической и физической химии имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, лаборатория химии
гетероциклических соединений, Казань, Россия.*

e-mail: dariya.nikolaeva.00@mail.ru

Разработана новая, без применения металлокатализаторов и металлореагентов восстановительная внутримолекулярная перегруппировка типа ANRORC нитробензолов и немодифицированных иминов, обеспечивающая простой и прямой доступ к широкому спектру 2-(бензимидазол-2-ил)хинолин-4(1H)-онов через каскад преобразований, а именно «функционализацию N(sp³)-Н связи/образование связи N(sp³)-C(sp²) в результате нуклеофильного присоединения/раскрытие кольца с расщеплением связи N(sp³)-C(sp³)/замыкание кольца с образованием связи C(sp²)-C(sp²)» из легкодоступных 3-(2-(2-нитрофенил)-2-оксоэтил)хиноксалин-2(1H)-онов при использовании Na₂S₂O₄ в качестве восстановителя [1].



Практическая значимость этой методологии, которая базируется на перегруппировке Мамедова [2] дополнительно продемонстрирована в синтезе 2-(имидазо[4,5-*b*]пиридин-2-ил)хинолин-4(1H)-она, 2-(пурин-8-ил)хинолин-4(1H)-она и 2-(имидазол-2-ил)хинолин-4(1H)-она, а также каркаса 2,2'-([5,5'-бибензимидазол]-2,2'-диил)бис(хинолин-4(1H)-она).

Литература

1. V. L. Mamedova, S. V. Mamedova, D. E. Korshin, E. L. Gavrilova, V. A. Mamedov Russ. Chem. Rev., 2025, **94** (4), RCR5167.
2. A. Hassner, I. Namboothiri Organic Syntheses Based on Name Reactions, 3th ed.; Elsevier: Amsterdam, 2012; p 299.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФ (грант 24-13-00098).
Физико-химические исследования проведены в ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН.*

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ β -МЕТОКСАЛИЛЗАМЕЩЕННЫХ 1H-БЕНЗО[*d*]ХРОМЕНОВ С АММИАКОМ И ПЕРВИЧНЫМИ АЛИФАТИЧЕСКИМИ АМИНАМИ

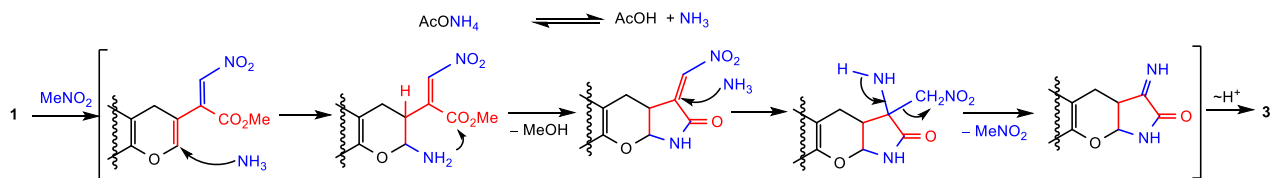
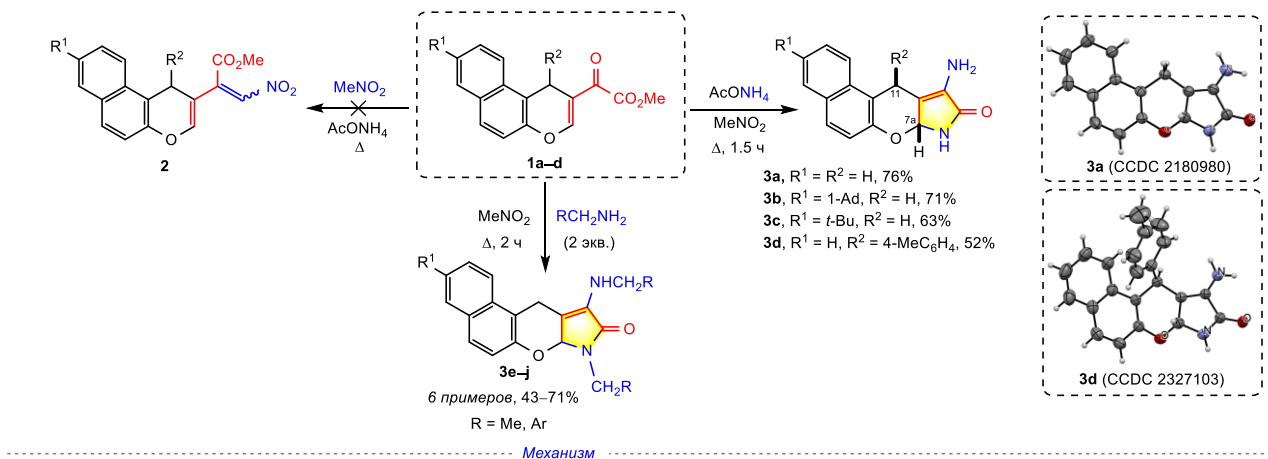
Осипов Д.В., Осянин В.А., Корженко К.С., Красников П.Е.

Самарский государственный технический университет,
Самара, Россия.e-mail: osipovdv25@mail.ru

Реакция Анри является важным и эффективным инструментом при создании C–C связей, а образующиеся β -нитроспирты могут быть легко превращены в различные кислород- и азотсодержащие продукты, включая аминокислоты, аминспирты, α -нитрокарбонильные и α -гидроксикарбонильные соединения. Кроме того, β -нитроспирты могут подвергаться последующей дегидратации с образованием сопряженных нитроалкенов, которые также широко используются в синтезе.

Нами была предпринята попытка введения метоксалилзамещенных бензохроменов **1a–d**, включая 1-толилзамещенный субстрат **1d**, в реакцию Анри с целью получения нитровинилхроменов **2**. Синтез проводили в кипящем нитрометане в присутствии ацетата аммония. Однако вместо ожидаемых нитроакрилатов **2** были выделены представители новой гетероциклической системы – дигидробензо[5,6]хромено[2,3-*b*]пиррол-9(11*H*)-оны **3a–d**. Следует отметить, что соединение **3d** образуется в виде единственного диастереомера с *транс*-расположением атомов водорода в положениях 7а и 11.

Поскольку данное превращение удалось осуществить только в нитрометане, можно предположить, что сначала протекает реакция Анри с последующей аза-реакцией Михаэля с участием аммиака, источником которого служит ацетат аммония. Далее происходит внутримолекулярная нуклеофильная атака по карбонильному атому углерода сложноэфирной группы и элиминирование метанола, в результате чего формируется пирролидиновый цикл. Наконец, присоединение второго эквивалента аммиака к нитровинильной группе и ретро-аза-реакция Анри приводят к иминам, которые изомеризуются в енамины **3a–d**. В данную реакцию также могут быть введены алифатические первичные амины с образованием конденсированных 1,5-дигидро-2*H*-пиррол-2-онов **3e–j**.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-23-00682).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОДЕФИЦИТНЫХ 4H-ХРОМЕНОВ С СОЕДИНЕНИЯМИ ПОЛИВАЛЕНТНОГО ИОДА И СПИРТАМИ

Осянин В.А., Корженко К.С., Красников П.Е., Осипов Д.В.

Самарский государственный технический университет,

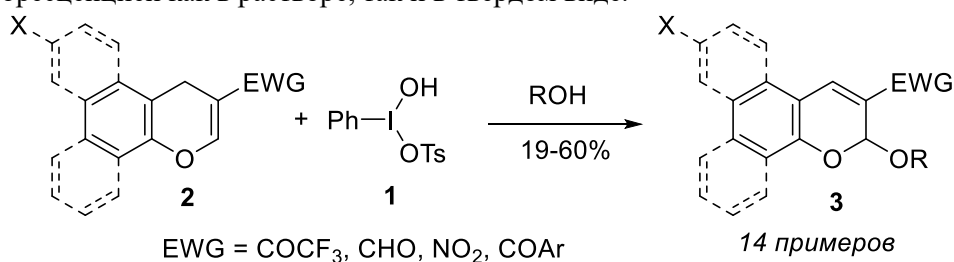
Самара, Россия.

e-mail: vosyanin@mail.ru

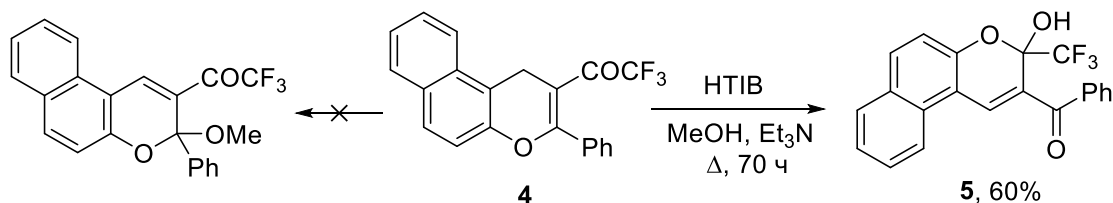
Высокополяризованные 4H-хромены являются достаточно активными акцепторами Михаэля и широко используются в синтезе самых разнообразных гетероциклических соединений. В то же время электронодонорные свойства атома кислорода в пирановом цикле могут обуславливать восприимчивость атома углерода, связанного с акцепторной группой, к электрофильной атаке. В качестве электрофилов, которые одновременно проявляют и окислительные свойства, мы исследовали $\text{PhI}(\text{OCOCF}_3)_2$, $\text{PhI}(\text{OAc})_2$ и $\text{PhI}(\text{OH})\text{OTs}$ (HTIB).

Оказалось, что под их действием электронодефицитные 4H-хромены в спиртовой среде окисляются до 2H-хроменов с одновременным введением алкокси-группы в α -положение к атому кислорода пиранового цикла. Наилучшие выходы были получены при использовании реагента Козера (HTIB) **1**. Следует отметить, что в настоящее время 2-алкокси-3-нитро-2H-хромены являются синтетически малодоступными, а их химические свойства практически не изучены. Так, в литературе описан только один способ получения 2-алкокси-3-нитро-2H-хроменов из салициловых альдегидов и ацеталей нитроацетальдегида, однако выходы не превышают 30%. При этом сами продукты представляют интерес в качестве потенциальных акцепторов Михаэля.

В реакцию удалось ввести хромены **2**, содержащие такие электроноакцепторные группы, как COCF_3 , CHO , COAr , NO_2 . На примере 2-нитро-1H-бензо[f]хромена были синтезированы различные метокси-, этокси- и изопропокси-замещенные 2-нитро-3H-бензохромены **3**, что демонстрирует возможность введения различных алкоксигрупп в пирановое кольцо. В случае трифторацетилзамещенных хроменов также удалось синтезировать метокси- и этоксипроизводные. Стоит отметить, что полученные продукты **3** обладают интенсивной флуоресценцией как в растворе, так и в твердом виде.



Неожиданный результат был получен при введении в реакцию с реагентом Козера 3-фенилзамещенного 2-трифторацетил-1H-бензо[f]хромена **4**. Вместо ожидаемого 2-метоксизамещенного 2H-хромена был выделен 2-бензоил-3-гидрокси-3H-бензо[f]хромен **5**.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 22-13-00253-П).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СИНТЕЗА НЕСИММЕТРИЧНЫХ МОЛЕКУЛ ВЫБОРОЧНОГО ПРОТЕОЛИЗА БЕЛКА НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ДИСПИРОИНДОЛИНОВ И ГЛУТАРИМИДА

Поляков В.С., Белоглазкина Е.К.

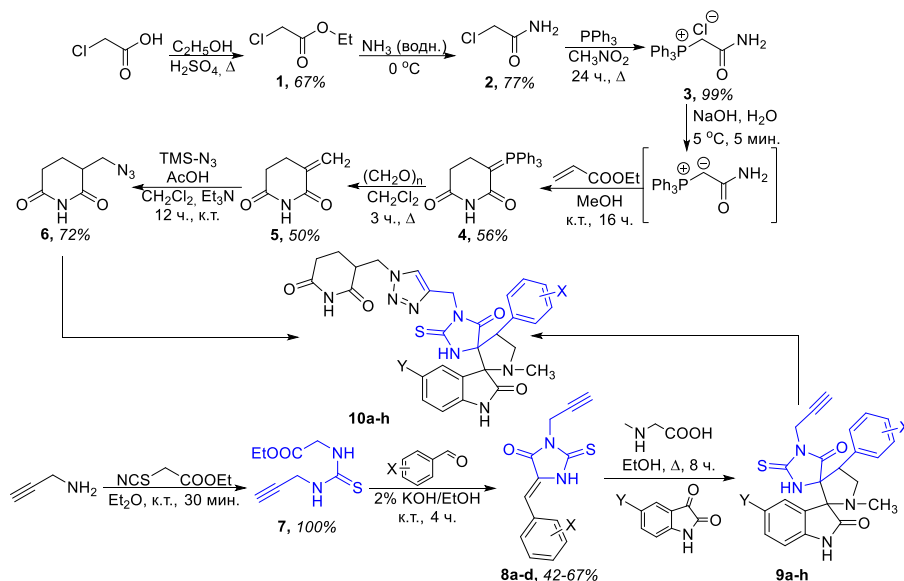
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, 119992, г.

Москва, ГСП-2, Ленинские горы, д.1, стр. 3

e-mail vladislavpolyakov@gmail.com

Молекулы типа PROTAC (сокр. от англ. *proteolysis targeting chimera*) в настоящее время являются одними из перспективных соединений для направленного разрушения целевых белков при терапии различных заболеваний белков. Эти молекулы состоят из двух функциональных фрагментов, связанных линкером: один фрагмент связывается с желаемым белком, а второй — с E3 убиквитин лигазой [1]. В результате целевой белок подвергается убиквитинилированию и разрушается в протеасоме. Ранее нашей научной группой были получены производные диспироиндолинонов, проявляющие высокую противоопухолевую активность на различных клеточных линиях [2]. В данной работе рассматривается возможность получения соединений типа PROTAC на основе данных диспироиндолинонов.

Для получения целевых соединений сначала был синтезирован glutarimide (лиганд E3 убиквитин лигазы), модифицированный по 3-му положению цикла азидометильным заместителем [3-4]. Далее исходя из пропаргиламина была получена серия производных 3-пропаргил-2-тиодиспироиндолинона, и далее исследовалась возможность синтеза конъюгатов диспироиндолинонов и glutarimide реакцией 1,3-диполярного циклоприсоединения [2] для дальнейшего изучения биологической активности полученных соединений.



Литература

1. Békés M., Langley D.R., Crews C.M. *Nat. Rev. Drug Discov.*, 2022, **21**, 3, 181–200.
2. Ivanenkov Y.A., Kukushkin M.E., Beloglazkina A.A., Shafikov R.R., Barashkin A.A., Ayginin A.A., Serebryakova M.S., Majouga A.G., Skvortsov D.A., Tafeenko V.A., Beloglazkina E.K. *Molecules*, 2023, **28**, 1325.
3. Shevalev R., Bischof L., Sapegin A., Bunev A., Olga G., Kantin G., Kalinin S., Hartmann M.D. *Eur. J. Med. Chem.*, 2024, **270**, 116328.
4. Khuzhakhmetova L.R., Ananeva A.A., Kantin G.P., Dar'in D.V., Bunev A.S., Ebeling S., Herrmann A., Hartmann M.D., Kalinin S.A., Bakulina O.Y. *Mendeleev Commun.*, 2025, **35**, 69–72.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-13-00004).

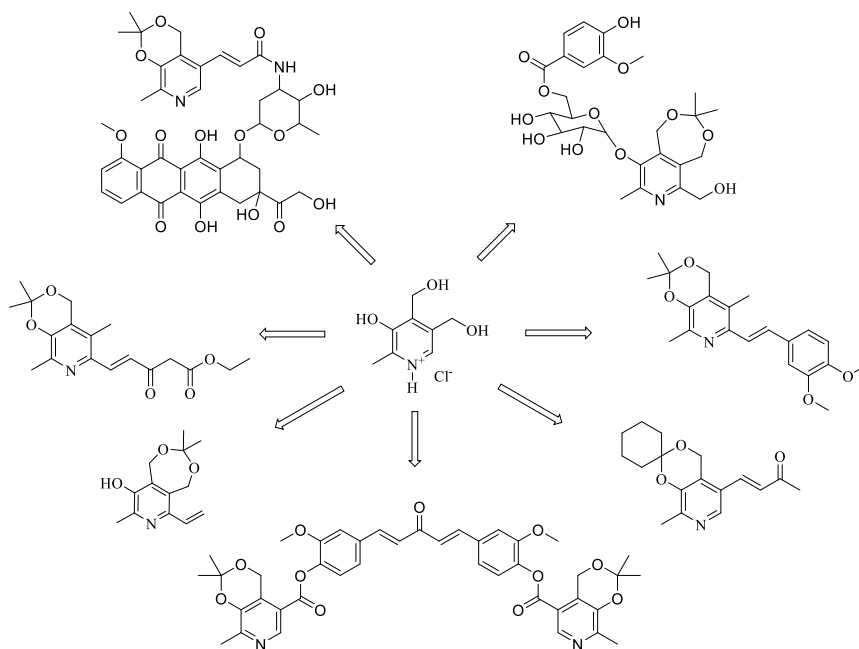
СИНТЕЗ И ПРОТИВООПУХОЛЕВАЯ АКТИВНОСТЬ *IN VITRO* ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДОКСИНА

**Пугачев М.В., Хазиев Р.М., Лаптева Е.А., Павельев Р.С., Бондарь О.В.,
Агафонова М.Н., Штырлин Ю.Г.**

Казанский (Приволжский) федеральный университет,
научно-образовательный центр фармацевтики, Казань, Россия.
e-mail: mpugache@kpfu.ru

Разработка противоопухолевых агентов, обладающих высокой эффективностью и безопасностью, является одним из приоритетных направлений в медицинской химии.

В рамках проведенных исследований был синтезирован широкий ряд соединений на основе пиридоксинового скаффолда с противоопухолевой активностью, структуры некоторых из них представлены на нижеприведенном рисунке [1]. В настоящей работе в три - пять стадий получены производные пиридоксина, содержащие фрагменты цитостатика доксорубина и природных соединений куркумина и С5-куркумина. Также в три - двенадцать стадий синтезированы пиридоксинсодержащие структурные аналоги природных соединений, таких как сахарумозида-Б, ферулоилметана, эстрадиола и халконов. По результатам скрининга противоопухолевой активности и токсичности *in vitro/in vivo* более 100 соединений были выявлены соединения-лидеры, которые представляют интерес в качестве высокоэффективных и безопасных доклинических кандидатов в противоопухолевые лекарственные средства.



Литература

1. Ю. Г. Штырлин, А. С. Петухов, А. Д. Стрельник, Н. В. Штырлин, А. Г. Иксанова, М. В. Пугачев, Р. С. Павельев, М. С. Дзюркевич, М. Р. Гарипов, К. В. Балакин *Изв. АН. Сер. хим.*, 2019, 5, 911.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения проектной части государственного задания в сфере научной деятельности № FZSM-2023-0010.

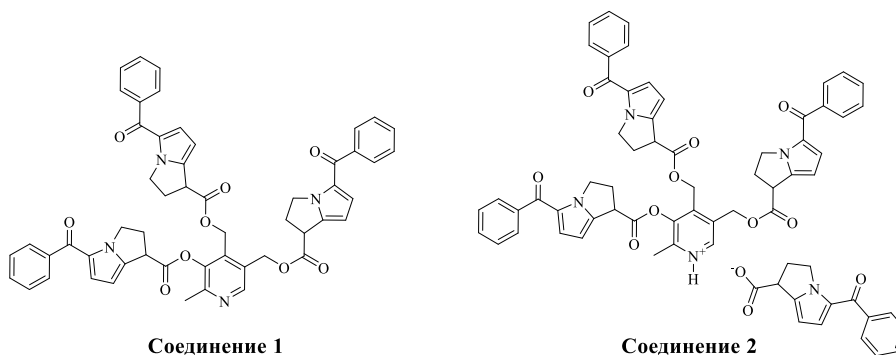
АНАЛЬГЕТИЧЕСКАЯ И ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ И БЕЗОПАСНОСТЬ IN VIVO ПРОЛЕКАРСТВЕННЫХ БИФАРМАКОФОРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ПИРИДОКСИНА

Пугачев М.В., Агафонова М.Н., Васильева О.С., Фафанова Е.М., Штырлин Ю.Г.

Казанский (Приволжский) федеральный университет,
научно-образовательный центр фармацевтики, Казань, Россия.
e-mail: mpugache@kpfu.ru

Нестероидные противовоспалительные препараты (НПВП) являются одним из наиболее употребляемых во всем мире типом лекарств. Наиболее эффективным ненаркотическим анальгетиком является кеторолак, однако он обладает серьезными побочными эффектами (эрозивно-язвенные поражения ЖКТ, нарушение функции почек, метаболический ацидоз).

В продолжение систематических исследований по синтезу и исследованию биологической активности производных пиридоксина [1] в настоящей работе синтезированы новые бифармакофорные производные, содержащие фрагменты пиридоксина и кеторолака (соединение **1** и **2**) [2].



С использованием тестов механического и химического раздражения, а также модели острого воспаления исследованы анальгетические и противовоспалительные свойства соединений **1** и **2**. Показано, что в моделях «Каррагениновый отек», «Укусные корчи», «Острое экссудативное воспаление» исследуемые соединения не уступают по анальгетической активности самому мощному из неопиодных анальгетиков кеторолаку трометамину, но при этом обладают более пролонгированным действием и меньшей токсичностью как при разовом, так и при ежедневном внутрижелудочном введении в течение 14 суток. Для соединений **1** и **2** ЛД₅₀ > 2000 мг/кг, что значительно превышает значения острой токсичности кеторолака (ЛД₅₀ = 189 мг/кг). Таким образом, полученные соединения могут представлять интерес в качестве перспективных кандидатов в лекарственные средства с улучшенным профилем безопасности и пролонгированности действия по сравнению с известными НПВП.

Литература

1. Ю. Г. Штырлин, А. С. Петухов, А. Д. Стрельник, Н. В. Штырлин, А. Г. Иксанова, М. В. Пугачев, Р. С. Павельев, М. С. Дзюркевич, М. Р. Гарипов, К. В. Балакин *Изв. АН. Сер. хим.*, 2019, **5**, 911.
2. М. В. Пугачев, Н. В. Штырлин, М. Н. Агафонова, О. С. Васильева, Е. М. Фафанова, Ю. Г. Штырлин *Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Естеств. науки.*, 2024, **166**, 608.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00350, <https://rscf.ru/project/24-23-00350/>

СИНТЕЗ СЕРНИСТЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ОСНОВЕ БИС-ТИОЭФИРОВ РЯДА 2(5H)-ФУРАНОНА И ДИТИОЛОВ

Раббаниева Э.С.^а, Апполонова Е.Г.^а, Герасимова Д.П.^б, Лодочникова О.А.^б,
Хабибрахманова А.М.^а, Курбангалиева А.Р.^а

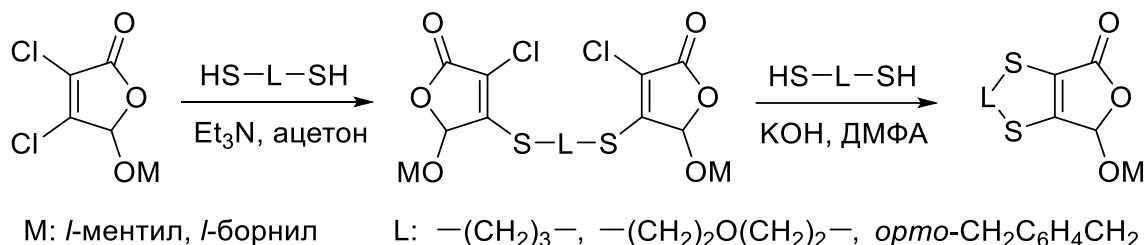
^аКазанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казань, Россия.

^бИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова –
ОСП ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия.

e-mail: EnSRabbanieva@kpfu.ru

Серосодержащие гетероциклы характеризуются большим структурным и функциональным разнообразием и широко представлены как в природных, так и в синтетически полученных биологически активных соединениях. Они входят в состав многих действующих веществ лекарственных препаратов, агрохимикатов, а также используются в материалах, обладающих оптическими, электронными и каталитическими свойствами. Данная работа посвящена разработке метода получения серосодержащих конденсированных би- и трициклических соединений на основе производных 2(5H)-фуранона и S,S-бинуклеофильных реагентов.

В качестве прекурсоров целевых би- и трициклических соединений исследованы оптически активные бис-тиоэфиры ряда 2(5H)-фуранона, в молекулах которых фрагмент дитиола (пропан-1,3-дитиол, 2,2'-оксидиэтантол, 1,2-фенилендиметантол) соединяет два ненасыщенных γ-лактонных цикла по атомам углерода C(4). При взаимодействии бис-тиоэфиров с соответствующими дитиолами в ДМФА в основной среде получены новые стереоизомерно чистые сернистые би- и трициклические конденсированные соединения с остатком *l*-ментола или *l*-борнеола у насыщенного атома углерода лактонного цикла, содержащие фрагмент 1,4-дитиопина, 1,4,7-оксидитионина или 1,4-бензодитионина. Строение всех новых оптически активных бис-тиоэфиров и S-гетероциклов, несущих фураноновый цикл, доказано методами спектроскопии ИК, одномерной и двумерной спектроскопии ЯМР. Молекулярная структура 5 синтезированных соединений охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа.



В проведенных реакциях происходит замещение одной серосодержащей группы на другую, что позволяет классифицировать данные превращения как реакции перетилирования или тиолат-тиолатного обмена, которые представлены в литературе единичными примерами. Следует отметить, что реакцию перетилирования бис-тиоэфиров можно рассматривать в качестве эффективного метода получения полициклических сернистых гетероциклов, которые трудно получить другими методами, например, прямым тиолированием 5-алкоксипроизводных 2(5H)-фуранона.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-00261, <https://rscf.ru/project/24-73-00261>.

СИНТЕЗ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПЛЕКСОВ КРЕМНИЯ(IV) С ОКТАПРОПИЛЗАМЕЩЕННЫМИ ПОРФИРАЗИНОМ И КОРРОЛАЗИНОМ

Рычихина Е.Д., Вьялкин Д.А., Ерошин А.В., Иванова С.С., Жабанов Ю.А.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия.

e-mail: katyarychikhina@gmail.com

Комплексы Si(IV) с порфиразинами (Pz) и их структурными аналогами, в которых отсутствует один мезо-атом азота - корролазинами (Cz), представляют собой перспективный класс тетрапиррольных соединений с разнообразными и настраиваемыми физико-химическими свойствами. Эти комплексы обладают интересными оптическими, электронными и фотосенсибилизирующими свойствами. Возможность варьировать заместители как в аксиальном положении, так и по периферии тетрапиррольного макроцикла позволяет целенаправленно управлять важными свойствами этих комплексов (люминесценция, генерация синглетного кислорода, устойчивость и др.), что делает их привлекательными для применения в таких областях, как фотодинамическая терапия и органическая электроника[1].

В данной работе впервые получены Si(IV) комплексы с октапропилзамещенными порфиразином ($L_2SiPzPr_8$) и корролазином ($LSiCzPr_8$) (Рис. 1). Полученные соединения охарактеризованы с помощью спектральных методов анализа (ЭСР, ИК, 1H ЯМР). Для $F_2SiPzPr_8$ было проведено масс-спектрометрическое исследование процесса сублимации с помощью эффузионного метода Кнудсена на масс-спектрометре МИ-1201, модифицированного для термодинамических исследований (Рис. 1). Энтальпия сублимации рассчитана на основании температурных зависимостей интенсивностей молекулярного иона с использованием уравнения Клапейрона-Клаузиуса, $\Delta_{субл}H = 191(4)$ кДж/моль. Значение энтропии сублимации $F_2SiPzPr_8$ составило 293(2) Дж/моль. Порфиразин $F_2SiPzPr_8$ показывает сопоставимые значения квантовых выходов флуоресценции ($\Phi_F = 0,55$) и генерации синглетного кислорода ($\Phi_\Delta = 0,44$).

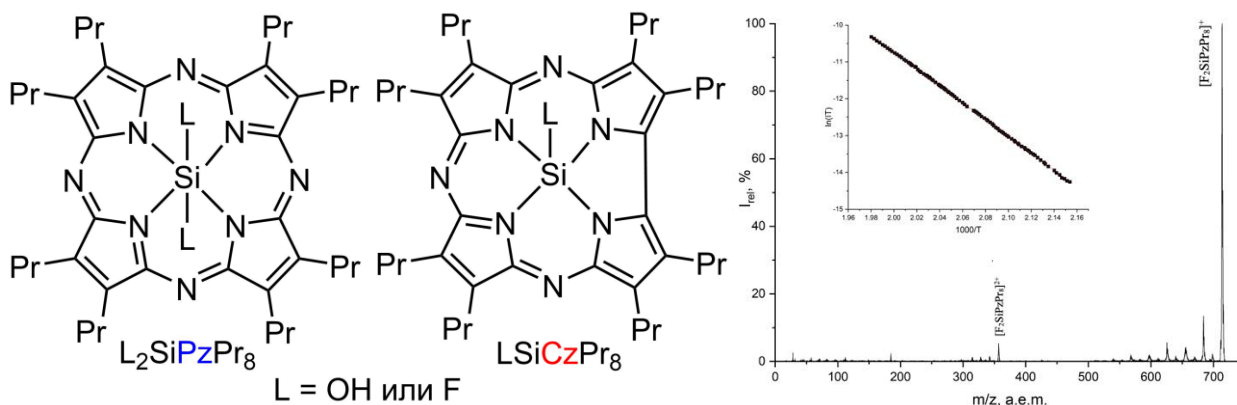


Рис. 1 - Структуры Si(IV) комплексов; масс-спектр для $F_2SiPzPr_8$, вставка - температурная зависимость интенсивности молекулярных ионов в температурном интервале 464 – 511 К

Литература

1. X.-F. Zhang. *Coord. Chem. Rev.*, 2015, **285**, 52-64.

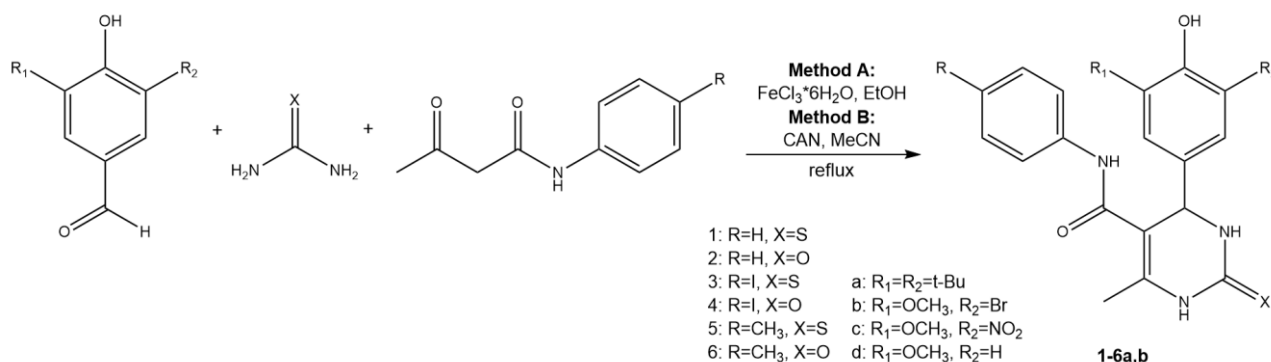
Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 24-73-10107).

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ДИГИДРОПИРИМИДИНОВ (-ТИОНОВ) С ФЕНОЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ АНТИОКИСЛИТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ

Сабитов Э.Р., Снастина О.В., Сивакова А.П., Куричьева В.А.

РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина,
факультет химической технологии и экологии, Москва, Россия.
e-mail: erikser@yandex.ru

Дигидропиримидиноны (-тионы) являются перспективным классом гетероциклических соединений и получили широкое применение в фармакологии за счет широкого спектра проявляемой биологической активности: противоопухолевой [1], антигипертензивной [1], противовирусной [1], антибактериальной [2], а также антиокислительной активности [3]. Фенольные фрагменты, являясь акцепторами свободных радикалов, при введении в гетероциклическую систему дигидропиримидинонов (-тионов) могут существенно усиливать их восстановительный потенциал. При этом структурные особенности таких «комбинированных» соединений оказывают критическое влияние на механизм взаимодействия с активными формами кислорода. Основным способом получения данного класса соединений является реакция Биджинелли:



Было установлено, что оптимальные выходы продуктов достигаются при использовании $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ или церий-аммоний нитрата (CAN) в качестве катализатора, при этом использование CAN приводило к образованию более чистых продуктов. Это позволило получить ряд соединений с различными заместителями в положении С-5 пиримидинового ядра и исследовать их антиокислительные свойства методами FRAP и ABTS. Все производные дигидропиримидинонов (-тионов) демонстрируют выраженную антиоксидантную активность, значительно превосходящую промышленный антиоксидант агидол-1. Наибольшую активность в ABTS-тесте проявили соединения **5d**, **6a** и **2d**, содержащие 4-гидрокси-3-метоксифенильный фрагмент. В FRAP-тесте наилучшие результаты показали **4b** и **3d**, причем введение иодфенильной группы в амидный фрагмент **4b** существенно усилило восстановительную способность. Тионовые и оксо-аналоги сопоставимы по эффективности, но ключевое влияние оказывает фенольный фрагмент.

Литература

1. Fatima A., Braga T.C., Neto L.S., Terra B.S., Oliveira B.G.F., da Silva D.L., Modolo L.V. A mini-review on Biginelli adducts with notable pharmacological properties. J. Adv. Res. 2015;6:363–373.
2. Castro Jara M. et al. Dihydropyrimidinones against multiresistant bacteria //Frontiers in Microbiology. – 2022. – Т. 13. – С. 743213.
3. Kaur R. et al. Recent synthetic and medicinal perspectives of dihydropyrimidinones: A review //European journal of medicinal chemistry. – 2017. – Т. 132. – С. 108-134.

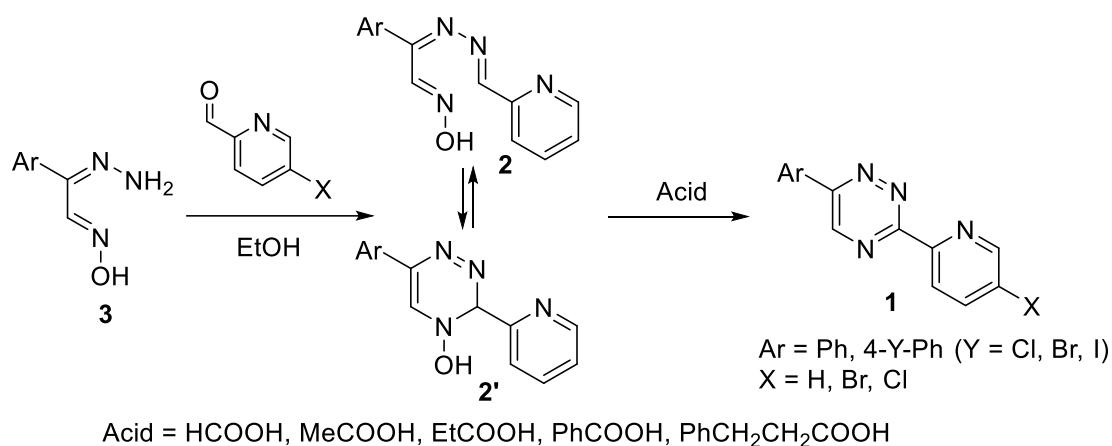
АРОМАТИЗАЦИЯ 3-(2-ПИРИДИЛ)-1,2,4-ТРИАЗИНОВ В РЕЗУЛЬТАТЕ ДЕГИДРАТАЦИИ В ПРИСУТСТВИИ РАЗЛИЧНЫХ КИСЛОТ

Сайфутдинова Ю.М.^а, Криночкин А.П.^{а,б}, Ватолина С.Е.^а, Копчук Д.С.^{а,б}, Зырянов Г.В.^{а,б}

^аУральский Федеральный Университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

^бИнститут органического синтеза УрО РАН,
620219, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 22
e-mail: iulia.saifutdinova@urfu.ru

1,2,4-Триазины являются важным классом гетероциклических соединений ввиду своей биологической активности и возможностям химической модификации в другие классы соединений, в частности, производные пиридинов, зачастую недоступные другими методами. Одним из методов синтеза 6-(гет)арил-1,2,4-триазинов, имеющих в положении С3 фрагмент 2- или 4-пиридила, является конденсация гидразонов изонитрозоацетофенонов и соответствующего альдегида. Собственно 1,2,4-триазиновое ядро формируется в результате дегидратации интермедиата, находящегося в равновесии циклической и открыто-цепной форм [1]. В ранее предложенных методиках дегидратация реализуется в среде ледяной уксусной кислоты.



В данной работе мы изучили возможности использования других кислот различной природы для реализации стадии дегидратации на примере различных 1,2,4-триазинов 1. Было обнаружено, что использование органических кислот (муравьиная, пропионовая, бензойная, 3-фенилпропионовая) также позволяют реализовать это превращение при условиях, сопоставимых с таковыми в случае применения уксусной кислоты. При этом бензойная и 3-фенилпропионовая кислоты были опробованы в условиях отсутствия растворителя с положительным результатом. Однако, использование минеральных кислот (серная, соляная) не привело к желаемому результату, в этих случаях наблюдалось осмоление реакционной массы.

Литература

1. *Tetrahedron*, **2008**, Vol. 64, P. 8963-8973. doi 10.1016/j.tet.2008.06.040.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 25-73-30016).

СИНТЕЗ НОВЫХ ТЕТРАЗОЛСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ 2-ГИДРАЗИНИЛПИРИМИДИН-4-ОНОВ

Антоненко Д. В.^{а, б}, Скрыльникова М.А.^{а, б}

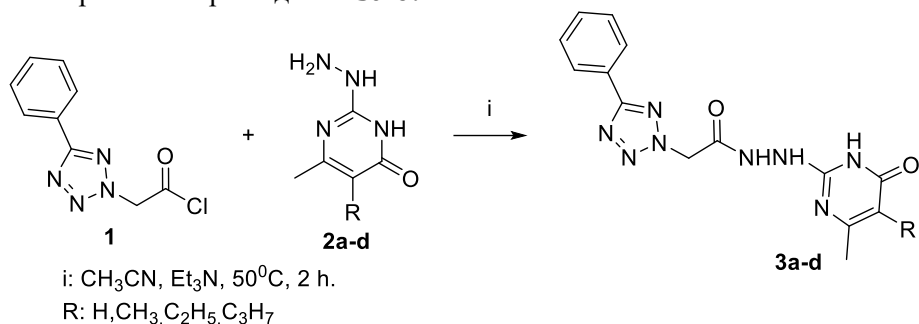
^а Санкт-Петербургский Федеральный исследовательский центр Российской академии наук, научно-исследовательский центр экологической безопасности, Санкт-Петербург, Россия

^б Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: mari954@mail.ru

В области медицинской химии значительное внимание уделяется поиску и исследованию биологической активности неаннелированных полиядерных (гибридных) гетероциклических соединений. Одним из примеров являются соединения, где связь тетразольного кольца возможна через линкерную группу с другим (как минимум одним) гетероциклическим фрагментом [1]. Такие соединения исследуются, как потенциальные кандидаты в роли активных фармацевтических ингредиентов (АФИ) с мультитаргетным действием. Следствием включения тетразольного цикла в молекулу органического субстрата зачастую становится усиление биологической активности и пролонгирование терапевтического эффекта [2].

В рамках нашей работы был выполнен прогноз активности неаннелированных тетразолилпиримидинов **3a-d**, выполненный с помощью компьютерной системы PASS 2022, где подтверждается их возможная биологическая активность в направлении противовирусного, противоопухолевого и противодиабетического действия.

В процессе был разработан рациональный метод синтеза тетразолсодержащих полиядерных соединений, основанный на взаимодействии хлорангида 5-фенилтетразол-2-илуксусной кислоты **1** с гидразинильными производными пиримидин-4-онов **2a-d**. Известно, что гидразинильные производные пиримидина легко реагируют с электрофилами в присутствии оснований, однако в нашем случае была вероятность иминольной таутомерии, что увеличивало количество реакционных центров для ацилирования. Однако было установлено, что применение триэтиламина в качестве основания и режим оптимальной температуры, способствует получению заданных тетразолилпиримидинов **3a-d**.



Образцы соединений **3a-d** переданы в профильные научные центры для тестирования *in vivo* и *in vitro* активности.

Литература

1. V. A. Ostrovskii, E. A. Popova, R. E. Trifonov // Comprehensive Heterocyclic Chemistry IV. 2022. vol. 6, pp. 182-232.
2. В. А. Островский, Н. Т. Шманёва, И. С. Ершов, Д. В. Антоненко, М. А. Скрыльникова, А. В. Храмчихин, Е. Н. Чернова, А. Ю. Гришина, Н. А. Анисимова, С. М. Напалкова, О. В. Буюклинская, В. С. Мажай, Ю. Н. Павлюкова, Р. Е. Трифонов // Известия Академии наук. Серия химическая. 2024. Т. 73, № 7. С. 1977 – 1983.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 23-13-00224).

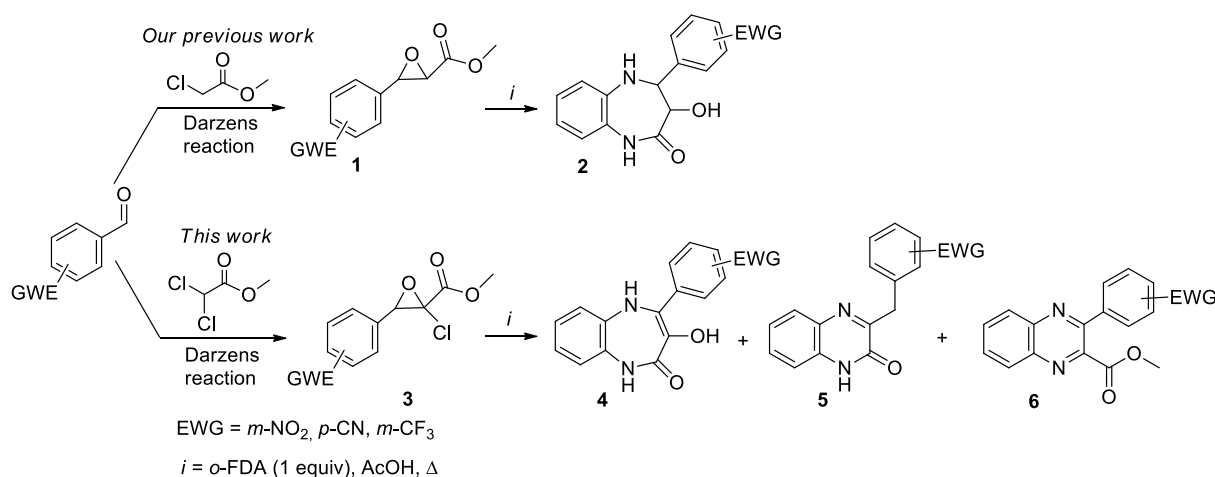
ПРОДУКТЫ БЕНЗОДИАЗЕПИНОВОГО И ХИНОКСАЛИНОВОГО РЯДОВ В РЕАКЦИЯХ 3-АРИЛ-2-ХЛОРГЛИЦИДАТОВ С *ОРТО*-ФЕНИЛЕНДИАМИНОМ

Степанов Р.С., Мамедова В.Л., Губайдуллин А.Т., Синяшин О.Г., Мамедов В.А.

Институт органической и физической химии имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, лаборатория химии гетероциклических соединений, Казань, Россия.

e-mail: romastep43@gmail.com

α,β -Эпоксикарбонильные соединения и их производные – популярные строительные блоки в органическом синтезе, в том числе и при получении различных гетероциклических систем [1]. Ранее в реакциях *транс*-метил-3-арилглицидатов (**1**) с акцепторными заместителями (EWG) в арильном фрагменте с одним эквивалентом *орто*-фенилендиамина (*о*-ФДА) в кипящей уксусной кислоте нами были получены 3-гидрокси-4-арил-4,5-дигидробензо[*b*][1,4]дiazепин-2(1*H*)-оны (**2**) [2]. Наличие геминального к сложноэфирной группе атома хлора в субстрате открыло путь к формированию новых продуктов в тех же условиях. Полученные в условиях конденсации Дарзана смеси *цис* и *транс* изомеров метил-2-хлор-3-арилглицидатов (**3**) реагировали с *о*-ФДА с образованием смеси трёх легко разделяемых продуктов: 4-арил-3-гидроксибензо[*b*][1,4]diazепин-2(1*H*)-онов (**4**), 3-бензилхиноксалин-2(1*H*)-онов (**5**) и метил-3-арилхиноксалин-2-карбоксилатов (**6**).



Таким образом показана возможность получения в одной реакции трёх практически значимых легко разделяемых продуктов бензодиазепинового и хиноксалинового рядов. Метод прост в исполнении, базируется на доступных исходных соединениях, характеризуется хорошими общими выходами. Варьирование заместителей позволяет смещать направление реакции в ту или иную сторону.

Литература

1. В.Л. Мамедова, Г.З. Хикматова, Д.Э. Коршин, С.В. Мамедова, Е.Л. Гаврилова, В.А. Мамедов *Успехи химии*, 2022, **91**, RCR5049.
2. V.A. Mamedov, V.L. Mamedova, V.V. Syakaev, J.K. Voronina, E.M. Mahrous, D.E. Korshin, Sh.K. Latypov, O.G. Sinyashin *Tetrahedron*, 2020, **76**, 131478.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РНФ (грант 24-13-00098).

Физико-химические исследования проведены в ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН.

СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛА НА ОСНОВЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АРИЛАМИНОВ, СЕРОУГЛЕРОДА И N-АРИЛМАЛЕИМИДОВ

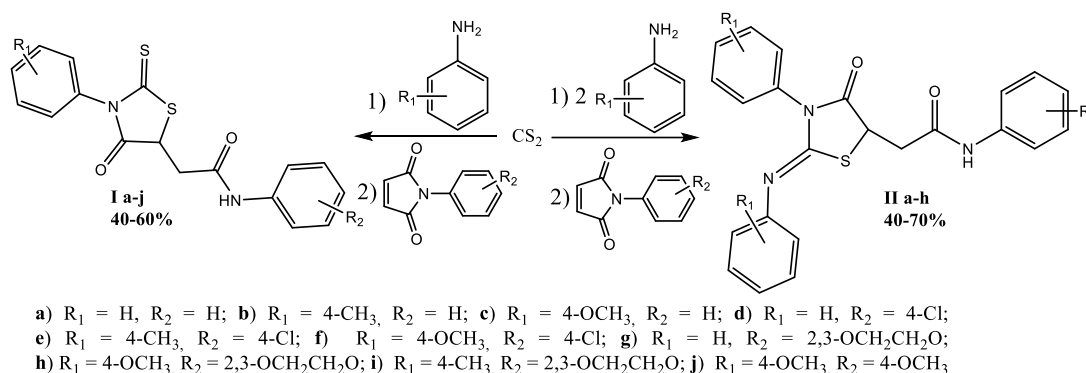
Столповская Н.В., Белоконь А.А., Шихалиев Х.С.

Воронежский государственный университет,
химический факультет, Воронеж, Россия.
e-mail: gusnv@yandex.ru

Направленный синтез новых drug-like молекул был и остается актуальной задачей органической химии. Одним из привилегированных гетероциклических каркасов, входящих в структуру широкого спектра биологически активных веществ, является цикл тиазола [1-3]. Кроме того, цикл тиазола входит в структуру внедренных в практику лекарственных средств, например, аминитрозола (а) и тенонитрозола.

Одним из стратегических вариантов построения тиазолидинового цикла является реакция рециклизации N-арилмалеимидов под действием 1,3-N,S-бинуклеофилов [4-6].

В данной работе заключалась изучен *one-pot* процесс взаимодействия ариламинов, сероуглерода и N-арилмалеимидов в различных условиях.



В результате *one-pot* процесса взаимодействия ариламинов с сероуглеродом и N-арилмалеимидами при разном соотношении реагентов получены два типа замещенных тиазолонов: N-арил-2-(3-арил-4-оксо-2-тиоксотиазолидин-5-ил)ацетамиды **I** и N-арил-2-(3-арил-2-арилимино-4-оксотиазолидин-5-ил)ацетамиды **II**. Взаимодействие ариламина с небольшим избытком сероуглерода в среде ацетонитрила приводит к N-арилдитиокарбаминовым кислотам, при добавлении к которым N-арилмалеимидов образуются соединения **I**. Взаимодействие двукратного избытка ариламина и сероуглерода в среде ацетонитрила приводит к N^1, N^2 -диарилтиомочевинам, при добавлении к которым N-арилмалеимидов образуются соединения **II**. В трехкомпонентном варианте при различном соотношении N-арилмалеимида, ариламина и сероуглерода мажорным продуктом реакции являются тиазолы **I**. Установлено, что 2-(3-(4-метоксифенил)-4-оксо-2-тиоксотиазолидин-5-ил)-N-(4-хлорфенил)ацетамид эффективно подавляет репликацию SARS-CoV-2.

Литература

1. M. Marzi, M. K. Vakil, M. Bahmanyar, E. Zarenezhad, *Biomed. Res. Int.*, 2022, **7**, 16.
2. L. Amiranashvili, N. Nadaraia, M. Merlani, C. Kamoutsis, A. Petrou, A. Geronikaki, P. Pogodin, D. Druzhilovskiy, V. Poroikov, A. Ciric, J. Glamočlija, M. Sokovic, *Antibiotics*, 2020, **9**(5), 224.
3. Г. В. Цаплин, А. С. Золотухина, Е. А. Алексеева, А. Л. Алексеев, С. В. Попков, *Изв. АН. Сер. Хим.*, 2023, **72**, 2125.
4. D. Y. Vandyshev, K. S. Shikhaliev, *Molecules*, 2022, **27**(16), 5268
5. H. G. Hahn, K. D. Nam, H. Mah, *Heterocycles*, 2001, **55**(7), 1283
6. J. Kinugawa, H. Nagase, *Yakugaku Zasshi*, 1966, **86**(2), 101

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2023-2025 годы, проект № FZGU-2023-0009

**РЕАКЦИИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ N,O-ГЕТЕРОЦИКЛОВ,
НЕСУЩИХ ЛАКТАМНЫЙ ФРАГМЕНТ, С РЕАКТИВАМИ ГРИНЬЯРА**

**Хабибрахманова А.М., Михайлов О.А., Фаизова Р.Г., Германенко Н.О.,
Латыпова Л.З., Курбангалиева А.Р.**

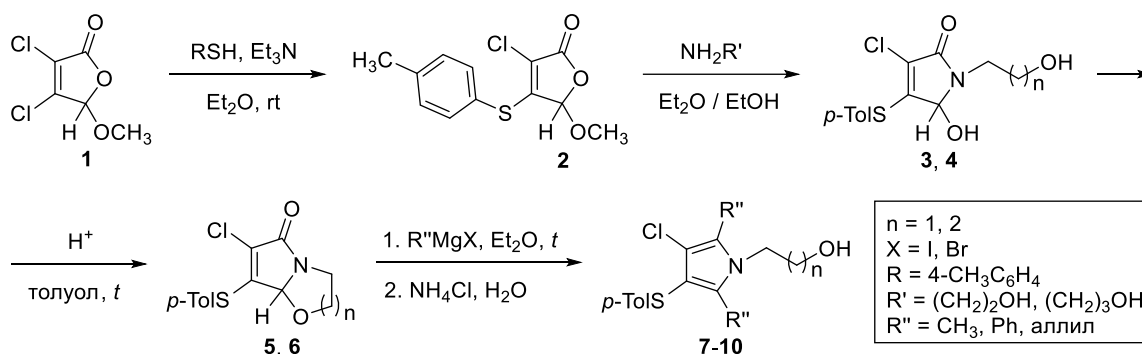
*Казанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
Казань, Россия.*

e-mail: AMHabibrahmanova@kpfu.ru

Производные 3-пирролин-2-она представляют собой ценные промежуточные вещества для синтеза целого ряда соединений, в том числе фармацевтически важных N-гетероциклов. Наличие конденсированной системы, содержащей пирролиноновый фрагмент, дополнительно увеличивает направления химической модификации и расширяет спектр биологически активных свойств. Например, гетероциклы с фрагментом 1,3-оксазолидина демонстрируют выраженную ингибирующую активность в отношении некоторых штаммов золотистого стафилококка, а некоторые представители обладают противогрибковыми, антибиотическими и антидиабетическими свойствами.

Целью данной работы явилась разработка препаративных методов синтеза новых функциональных производных 3-пирролин-2-она, получение конденсированных гетероциклов на их основе, а также исследование реакционной способности последних по отношению к магнийорганическим реагентам.

На первой стадии из 5-метоксифуранона **1** и 4-метилтиофенола в присутствии триэтиламина в качестве основания в диэтиловом эфире при комнатной температуре был синтезирован 4-[(4-метилфенил)сульфанил]-5-метокси-3-хлор-2(5H)-фуранон (**2**), который далее в реакциях с алифатическими аминспиртами (2-аминоэтанол, 3-аминопропанол-1) был превращен в соответствующие N-гидроксиалкильные производные 5-гидрокси-3-пирролин-2-она **3** и **4**. На следующем этапе новые пирролиноны **3** и **4**, молекулы которых содержат две гидроксильные группы (в боковой цепи заместителя у атома азота и у атома углерода C(5)), были подвергнуты внутримолекулярной дегидратации в условиях кислотного катализа. В результате получены новые конденсированные N,O-гетероциклы **5** и **6** с фрагментами ненасыщенного γ-лактама и оксазолидина или тетрагидро-1,3-оксазина.



Изучена реакционная способность бициклических соединений **5** и **6** по отношению к реагентам Гриньяра. Выявлено, что единственными продуктами реакции алкилирования явились производные пиррола **7–10** с углеводородными заместителями во втором и пятом положениях пятичленного цикла. Строение синтезированных гетероциклических соединений подтверждено методами спектроскопии ИК и ЯМР, а также методом рентгеноструктурного анализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 23-73-10182).

МЕХАНИСТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ФОРМИРОВАНИЯ АКТИВНЫХ НИКЕЛЕВЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ КАК ОСНОВА РАЗРАБОТКИ ЭФФЕКТИВНЫХ Ni(II)/NHC ПРЕКАТАЛИЗАТОРОВ В ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ

Хазипов О.В.,^a Чернышев В.М.,^a Анаников В.П.^{a,b}

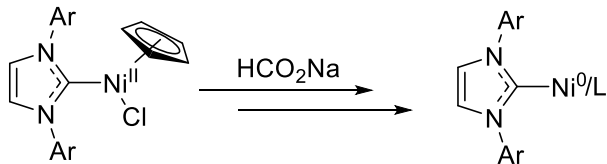
^aЮжно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова,
Новочеркасск, 346428,

^bИнститут Органической Химии им.Н.Д.Зелинского РАН,
119991, Москва, Ленинский проспект, 47
e-mail: hazipov@mail.ru

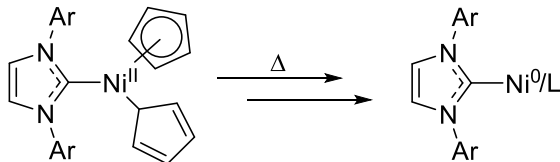
Каталитические системы на основе комплексов никеля с N-гетероциклическими карбеновыми лигандами (Ni/NHC) находят широкое применение в органическом синтезе, выступая эффективными катализаторами в различных трансформациях, включая реакции кросс-сочетания углерод–углерод, углерод–гетероатом, а также реакции функционализации органических соединений по C–H связи. Механизм указанных каталитических реакций, как правило, предполагает участие комплексов Ni(0)/NHC. Однако большинство таких комплексов являются дорогостоящими и крайне чувствительными к воздействию воздуха, что существенно осложняет их обращение и требует проведения всех манипуляций в условиях инертной атмосферы.

В докладе будут рассмотрены разработанные в нашей лаборатории методы генерации каталитически активных комплексов Ni(0)/NHC из доступных и устойчивых к воздуху прекурсоров. К числу таких подходов относятся:

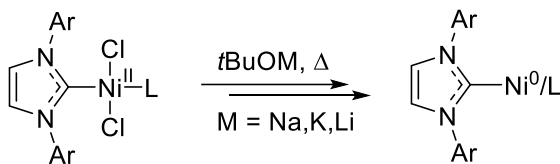
(1) генерация активных комплексов Ni(0)/NHC из комплексов Ni(II)/NHC с использованием формиата натрия в качестве восстановителя;



(2) применение комплексов Ni(II)/NHC, содержащих два цикlopentadiенильных солиганда, которые выступают в роли внутренних восстановителей атома никеля;



(3) использование трет-бутилатных оснований, выполняющих роль как оснований, так и восстановителя Ni(II) до Ni(0).



Разработанные подходы к формированию комплексов Ni(0)/NHC из прекурсоров Ni(II)/NHC позволяют эффективно генерировать высокоактивные каталитические системы Ni/NHC, применимые в реакциях гидрогетероарилрования алкенов, арилрования азолов арилхлоридами, а также в реакциях C–N кросс-сочетания. Эти методы существенно расширяют область практического применения катализаторов Ni/NHC в современном органическом синтезе.

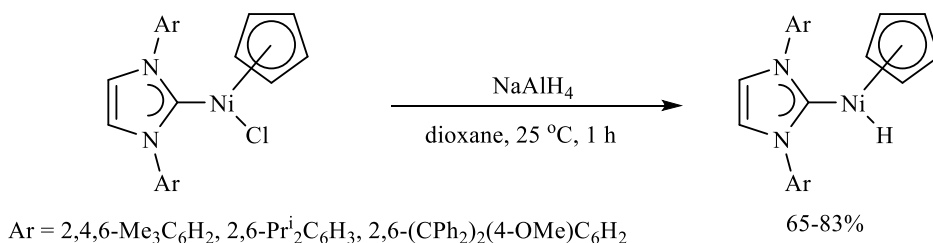
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00424).

КОМПЛЕКСЫ (NHC)Ni(H)(η^5 -C₅H₅): СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ В КАТАЛИЗЕХазипова О.В., Савостьянов А.П.

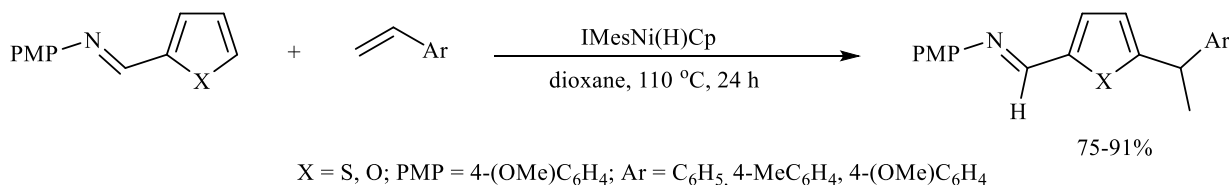
Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, 346428,
Россия, г.Новочеркасск, ул. Просвещения, 132
e-mail: hov.nvk@gmail.com

Гидридные комплексы никеля играют ключевую роль в металлоорганической химии [1]. В последние годы наблюдается интенсивное развитие исследований в данной области, что обусловлено высокой каталитической активностью этих соединений в разнообразных химических процессах. Такие комплексы находят широкое применение в реакциях функционализации C–H связей различных органических молекул, а также полимеризации, изомеризации и восстановлении алкенов. В связи с этим разработка новых методов синтеза гидридных комплексов никеля представляет собой актуальную научную задачу.

В рамках нашего исследования был предложен новый, более простой и эффективный метод получения гидридных комплексов никеля с N-гетероциклическими карбенами. Синтез основан на взаимодействии циклопентадиенильных комплексов (NHC)Ni(Cl)(C₅H₅) с NaAlH₄. Использование данного подхода позволяет с высоким выходом синтезировать гидридные комплексы (NHC)Ni(H)(C₅H₅).



Установлено, что комплекс (IMes)Ni(H)(C₅H₅) проявляет высокую каталитическую активность в реакции алкилирования фуран- и теофен-2-карбоксальдегидов алкенами.

**Литература**

1. N.A. Eberhardt, H.Guan. *Chem. Rev.*, **2016**, *116*, 8373-8426.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 24-23-00424).

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ НУКЛЕОФИЛЬНОЙ МОДИФИКАЦИИ BODIPY

Михеева С.Р., Шамбалова В.Э., Алдошин А.С., Ненайденко В.Г.

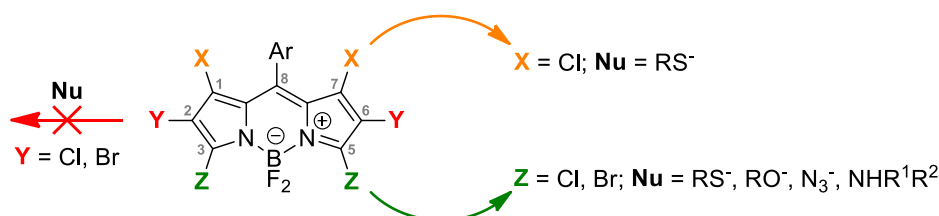
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

Химический факультет, Москва, Россия.

e-mail: sofiya.mikheeva.02@mail.ru

BODIPY являются важным классом органических красителей и характеризуются небольшой молекулярной массой, простотой синтеза и широкими возможностями настройки свойств с помощью постфункционализации, что позволяет создавать перспективные флуоресцентные сенсоры и фотосенсибилизаторы на их основе.

Нуклеофильная модификация 3,5-галогенпроизводных BODIPY хорошо изучена и позволяет вводить широкий круг нуклеофилов в ядро красителей (Схема 1). Напротив, нуклеофильная модификация 1,7-галогенпроизводных сильно затруднена из-за стерических препятствий со стороны заместителя в положении 8. В литературе описаны примеры взаимодействия 1,7-дихлор-BODIPY только с сильными тиолят-анионами [1].

Схема 1. Возможности и ограничения S_NAr галогенпроизводных BODIPY.

Недавно в нашей лаборатории был разработан эффективный модульный синтез трех семейств новых фторированных в ядре BODIPY с высокими выходами на основе последовательных превращений β -фтор- β -нитростиролов [2-4]. Было обнаружено, что наличие атомов фтора в ядре BODIPY открывает широкие возможности для нуклеофильной модификации красителей.

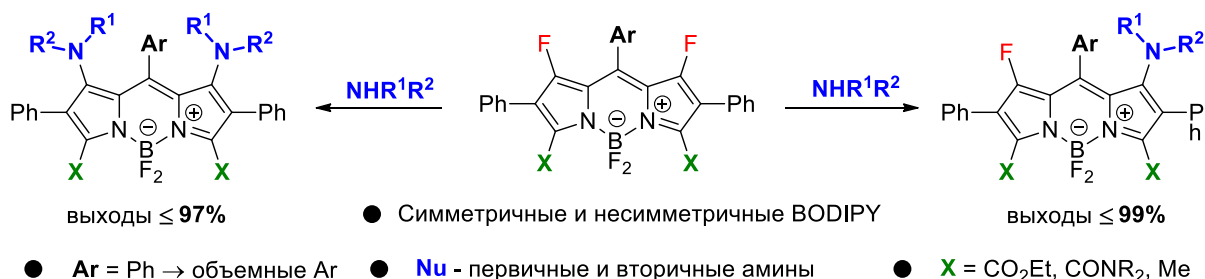


Схема 2. Получение моно- и диаминозамещенных BODIPY.

Данная работа посвящена раскрытию синтетического потенциала 1,7-дифтор-BODIPY в реакциях с аминами (Схема 2). Показана возможность получения как симметричных, так и несимметричных аминопроизводных BODIPY с выходами до количественных.

Литература

1. Y. Ooyama, S. Yagi, Eds., Progress in the Science of Functional Dyes, Springer, Singapore, 2021.
2. R.V. Larkovich, V.E. Shambalova, S.A. Ponomarev, A.S. Aldoshin, B.N. Tarasevich, K.A. Lyssenko, V. G. Nenajdenko *Dyes Pigm.*, 2024, **221**, 111822.
3. V.E. Shambalova, A. S. Aldoshin, D. A. Bunin, E. A. Safonova, A. A. Moiseeva, B. N. Tarasevich, Y. G. Gorbunova, V. G. Nenajdenko *ChemPhotoChem*, 2024, **8**, e202400209.
4. V.E. Shambalova, S.R. Mikheeva, A. S. Aldoshin, A. A. Moiseeva, E. A. Safonova, Y. G. Gorbunova, V. G. Nenajdenko *Int. J. Mol. Sci.*, 2025, **26**, 4484.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 23-73-00014).

Pd-КАТАЛИЗИРУЕМАЯ ЦИКЛИЗАЦИЯ 4,5-ДИЭТИНИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛОВ

Шонин Г.А., Балова И.А., Говди А.И.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: st128251@student.spbu.ru

В настоящее время гетероциклы активно используются во множестве областей химической промышленности: от производства красителей и пигментов до получения различных лекарств[1]. Особенно активно развивается направление, связанное с получением полициклических гетероциклов, имеющих большую и разветвленную сопряженную систему, обладающих люминесцентными свойствами. Ранее было показано, что 4,5-диэтинил-1,2,3-триазолы обладают интересными и перспективными люминесцентными свойствами[2], и могут выступать в качестве флуоресцентных меток для биологической визуализации. Поэтому в данной работе нами были исследованы способы получения сопряженных полициклических гетероциклов каскадной Pd-катализируемой циклизацией 4,5-диэтинил-1,2,3-триазолов. Для синтеза полиядерных триазолконденсированных структур нами были апробированы условия, описанные в работе [3]. В качестве исходных диэтинилтриазолов нами были выбраны соединения, содержащие нуклеофильные группы во втором положении арилэтинильного фрагмента, метоксикарбонильную, диметиламино- или метилсульфанильную группы.

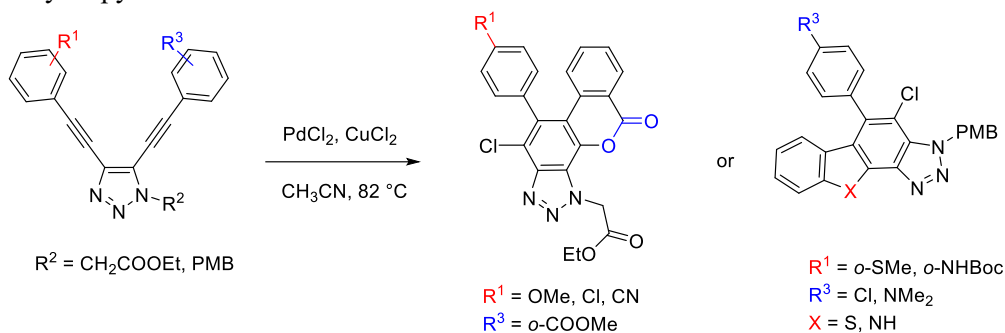


Рисунок 1. Синтез полициклических соединений на основе 4,5-диэтинил-1,2,3-триазолов.

Таким образом, палладий-катализируемая тандемная циклизация 4,5-бис(арилэтинил)-1,2,3-триазолов в присутствии $CuCl_2$ позволяет эффективно синтезировать производные бензохромена [4], индола и бензотиофена, конденсированных с 1,2,3-триазолом с хорошими выходами.

Литература

1. N. Kerru, L. Gummidu, S. Maddila, K. K. Gangu, S. B. Jonnalagadda *Molecules* 2020, **25** (8), 1909.
 2. A. I. Govdi, P. V. Tokareva, A. M. Romyantsev, M. S. Panov, J. Stellmacher, U. Alexiev, N. A. Danilkina, I. A. Balova *Molecules* 2022, **27**, 3191.
 3. C. C. Chen, C. M. Chen, M. J. Wu *J. Org. Chem.* 2014, **79** (10), 4704.
 4. W. R. Chang, Y. H. Lo, C. Y. Lee, M. Wu *Adv. Synth. Catal.* 2008, **350** (9), 1248.
 5. А. И. Говди, Г. А. Шонин, К. В. Кимеле, И. А. Балова *Журнал Органической Химии*, **2025**, в печати.
- Исследования проведены с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ: «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества» и «Рентгенодифракционные методы исследования».

**PYRAZOLE CARBOXYLATES WERE SYNTHESISED AND EVALUATED
FOR THEIR BIOLOGICAL ACTIVITY.**

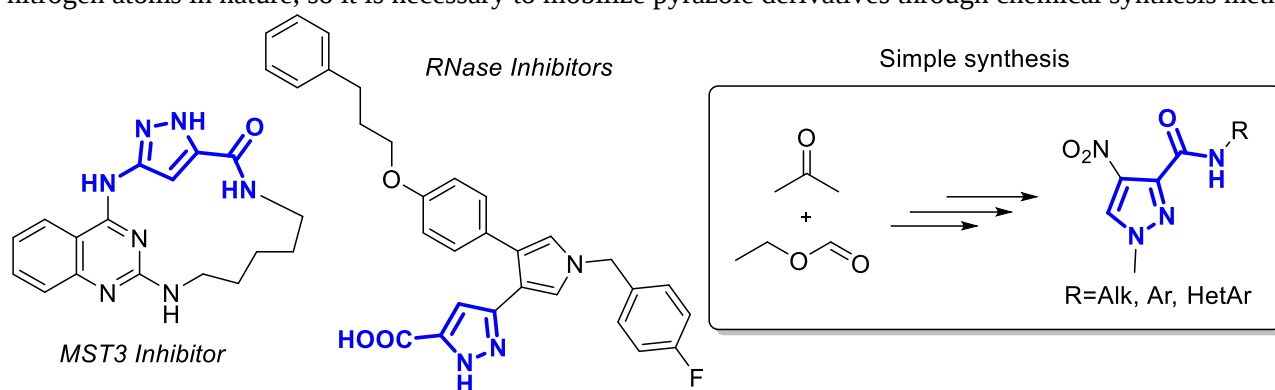
Sun Y.^a, Vorontsova S.M.^b, Ipatova D.A.^a, Skvortsov D.A.^a, Finko A.V.^a, Beloglazkina E.K.^a

^a*Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

^b*Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia*

e-mail: finko.alexander@gmail.com

Pyrazole derivatives are important heterocyclic compounds that exhibit anticancer activity, giving them a special status in medicinal chemistry. The FDA has approved a variety of compounds with pyrazole as the core for clinical treatment, including ibrutinib, ruxolitinib and baricitinib. [1]. Cyclin-dependent kinases (CDKs) are a group of serine/threonine protein kinases that play a key role in regulating the cell cycle. Dysregulation of CDK activity can cause uncontrolled cell proliferation, and abnormal CDK function is commonly observed in patients with malignant tumours [2]. CDK inhibitors can cause tumour cells to permanently exit the cell cycle and enter a senescent state, thereby preventing disordered tumour cell proliferation [3]. There are very few cyclic compounds containing adjacent nitrogen atoms in nature, so it is necessary to mobilize pyrazole derivatives through chemical synthesis methods [4].



A series of 1-methyl-4-nitropyrazole-3-carboxylic acid compounds was designed and synthesised. These compounds exhibited good cytotoxicity against the PC3 and HCT116 cell lines. Structure-activity analysis revealed that these compounds exhibit inhibitory activity against multiple phosphokinases, providing an excellent framework for developing compounds that inhibit tumour cell growth and reproduction by targeting phosphokinase activity.

Литература

1. M. Pang, A. Ramazani, Z. Zhang, et al. Reagent-Assisted Regio-Divergent Cyclization Synthesis of Pyrazole. *Org. Biomol. Chem.*, 2025, **23**, 2812-2817.
2. Hosamani K R, K. Hemalatha, R. Pal, et al. Pyrazole, Pyrazoline, and Fused Pyrazole Derivatives: New Horizons in EGFR-Targeted Anticancer Agents. *Chem. Biodiversity*, 2024, **21**(11), e202400880.
3. H. K. Matthews, C. Bertoli, R. A. M. de Bruin. Cell cycle control in cancer. *Nat. Rev. Mol. Cell. Biol.*, 2022, **23**, 74–88.
4. S. Fustero, M. Sánchez-Roselló, P. Barrio, et al. From 2000 to mid-2010: A fruitful decade for the synthesis of pyrazoles. *Chem. Rev.*, 2011, **111**(11), 6984-7034.



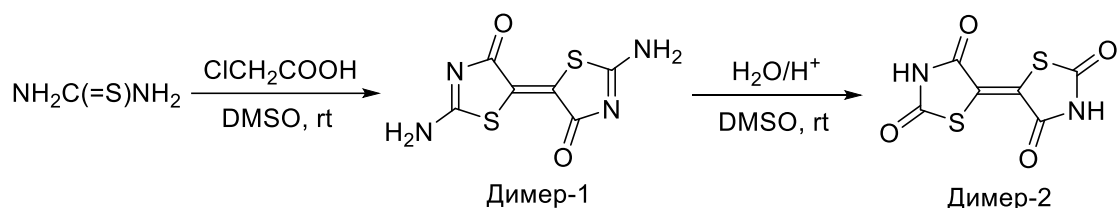
ЗАОЧНОЕ УЧАСТИЕ

НЕОЖИДАННОЕ ОБРАЗОВАНИЕ ДИМЕРНЫХ ПРОДУКТОВ В РЕАКЦИЯХ ТИОМОЧЕВИНЫ И 1,3-ДИАЛКИЛТИОМОЧЕВИН С ХЛОРУКСУСНОЙ КИСЛОТОЙ В ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИДЕ

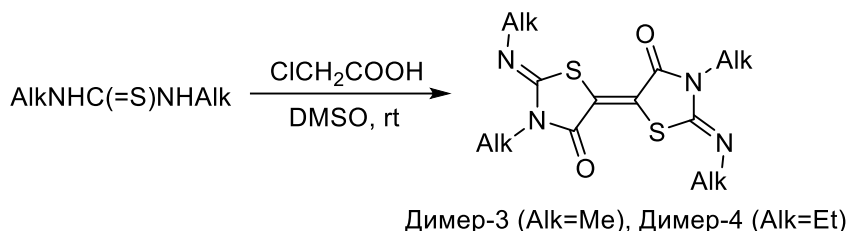
Андреева В.В., Смирнова Д.А., Рамш С.М.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия.
e-mail: laroll@yandex.ru

Реакция тиомочевина с хлоруксусной кислотой в ДМСО при лабораторной температуре приводит к образованию не только ожидаемых основных продуктов – псевдотиогидантоиновой кислоты гидрохлорида и псевдотиогидантоина гидрохлорида [1], но и двух неожиданных димерных продуктов: продукта окислительной димеризации псевдотиогидантоина – Димера-1, а также продукта кислотного гидролиза последнего – Димера-2, правда, с незначительными выходами (несколько %).



В реакциях 1,3-диалкилтиомочевин (Alk=Me, Et) с монохлоруксусной кислотой в тех же условиях димерные продукты преобладают: 70-90% в случае Димера-3 (Alk=Me) и 50-60% в случае Димера-4 (Alk=Et); при этом наряду с димерами с небольшими выходами образуются ожидаемые циклические гидрохлориды [2].



Литература

1. В.В. Андреева, Д.А. Смирнова, С.М. Рамш. *Изв. СПбГТИ(ТУ)*, 2024, **70(96)**, 42-52.
2. В.В. Андреева, Д.А. Смирнова, С.М. Рамш. *Изв. СПбГТИ(ТУ)*, 2024, **71(97)**, 47-54.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (госзадание FSEN-2023-0002).

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СМЕШАННОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ(II) С 1-(5-ХЛОРО(БРОМ)-2-ПИРИДИЛАЗО)-2-ГИДРОКС-4-МЕРКАПТОФЕНОЛОМ И 1,10-ФЕНАНТРОЛИНОМ

Аскерова З.Г.^а, Залов А.З.а, Абасгулиева У.Б.^а, Ширинов Э.Г.^б, Сафарова П.С.^б

^аАзербайджанский государственный педагогический университет, Баку, AZ1000 Азербайджан

^бМингячевирский государственный университет, Мингячевир, AZ 4500 Азербайджан

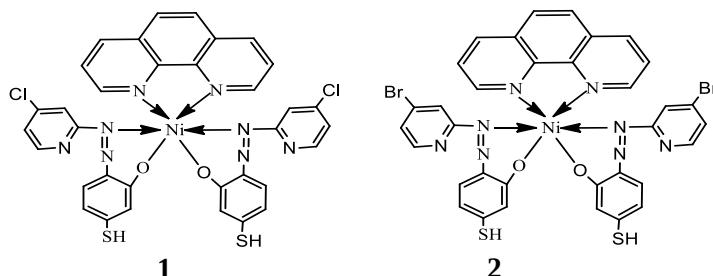
e-mail: zalov1966@mail.ru

Экстракционно-фотометрическим методом изучены реакции никеля(II) с азомеркаптофенолами (L) {1-(5-хлор-2-пиридилазо)-2-гидрокси-4-меркаптофенол (L₁), 1-(5-бром-2-пиридилазо)-2-гидрокси-4-меркаптофенол (L₂)} и фенантролином (Phen). После однократной экстракции хлороформом при соотношении водной и органической фаз 4:1 извлекается 97.6–98.5% никеля в виде смешанно-лигандного комплекса (СЛК). Оптимальный диапазон кислотности для комплексов Ni(II)-L₁-Phen (**1**) и Ni(II)-L₂-Phen (**2**) находится при рН_{опт.} 5.1–7.3 (рН_{форм.} 3.2–8.4) и рН_{опт.} 5.2–7.2 (рН_{форм.} 3.4–8.2) соответственно. Максимум поглощения комплексов никеля **1** и **2** приходится на 580 нм и 595 нм соответственно. Молярные коэффициенты поглощения составляют $\epsilon_{580} = 3.4 \times 10^4$ для **1** и $\epsilon_{595} = 3.2 \times 10^4$ для **2**. Соблюдение фундаментального закона поглощения света достигается в интервале концентраций $C_{Ni(II)} = 0.18–22$ мкг мл⁻¹. Калибровочные уравнения рассчитываются как: $y = 0.291x + 0.028$ (ЛОД = $3.3 \times 4.328 / 0.9652 = 15$ нг мл⁻¹ и ЛОГ = $10 \times 4.328 / 0.9652 = 45$ нг мл⁻¹ для **1**) и $y = 0.295x + 0.033$ (ЛОД = $3.3 \times 4.915 / 0.9903 = 16$ нг мл⁻¹ и ЛОГ = $10 \times 4.915 / 0.9903 = 2.48$ нг мл⁻¹ для **2**). Молярное соотношение компонентов СЛК следующее: Ni(II): L:Phen = 1:2:1. Полученные результаты показали, что комплексообразующим ионом никеля является двухвалентный катион Ni²⁺. MLC не полимеризуется в хлороформе ($\gamma = 1.08–1.13$).

Ni-L₁-Phen: Найдено, %: C 54.27; H 2.48; N 12.05; O 4.17; S 8.23; Cl 10.19; Ni 7.32. C₃₄H₂₀N₆O₂S₂Cl₂Ni. Вычислено, %: C 55.36; H 2.71; N 11.39; O 4.34; S 8.68; Cl 9.63; Ni 7.87.

Ni-L₂-Phen: Найдено, %: C 48.86; H 2.67; N 11.74; O 3.96; S 7.88; Br 9.67; Ni 7.44. C₃₄H₂₀N₆O₂S₂Br₂Ni. Вычислено, %: C 49.42; H 2.41; N 10.17; O 3.87; S 7.75; Br 19.37; Ni 7.03.

Элементный анализ выделенных соединений согласуется с формулой Ni-L-Phen, установленной по указанным выше методикам. Исходя из полученных данных, мы предлагаем следующую структуру выделенных МЛК:



Термогравиметрическое исследование комплексов C₃₄H₂₂N₆O₄S₂Cl₂(Br₂)Ni показало, что они устойчивы до 170°C. Термическое разложение комплексов происходит в три стадии. При 175–200°C вода испаряется - общая потеря массы составляет 4.4% (для **2** 4.3%), на второй стадии при 350–420°C разлагается Фен. Потеря массы составляет 23.5% (для **2** 21.3%). Третья стадия в интервале температур 488–510°C происходит разложение L и потеря массы составляет 88.9% (для **2** 90.1%). В обоих случаях конечным продуктом термолитиза комплекса является NiO. На определение Ni(II) не влияют ионы щелочных, щелочноземельных и редкоземельных элементов. Разработанный экстракционно-фотометрический метод использован для определения никеля в сточных водах, металлическом магнии, минерале карналлите, образцах нефти и нефтепродуктах.

ПОЛУЧЕНИЕ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ 5,5-ДИЗАМЕЩЕННЫХ-1,3-ДИОКСАНОВ

Борисова Ю.Г., Зинатуллин Р.Р., Раскильдина Г.З.

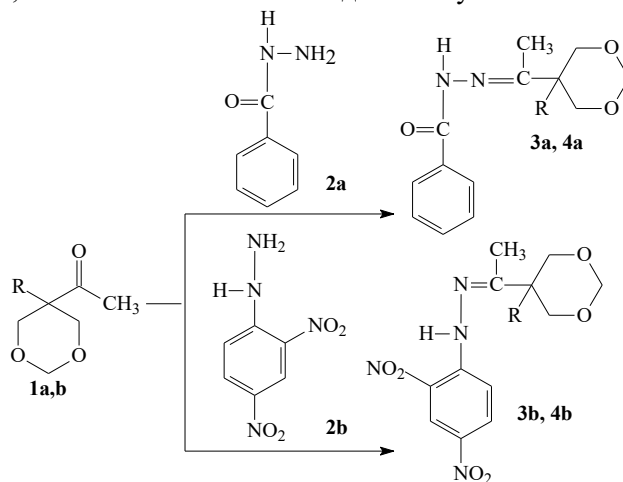
ФГБОУ ВО Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия

e-mail: yulianna_borisova@mail.ru

Важным классом гетероциклических соединений, представляющих значительный интерес вследствие разнообразия химических превращений и возможностей практического использования, являются 1,3-диоксациклоалканы и их производные [1, 2]. В частности, 1,3-диоксановый фрагмент входит в структуру соединений, обладающих противовирусной, антиагрегационной, антикоагуляционной, фунгицидной и гербицидной активностью [3].

В этой связи, актуальным направлением исследования с использованием распространенных нефтехимических реагентов является синтез новых циклических ацеталей. С целью продолжения наших экспериментальных работ, мы использовали 5,5-дизамещенные-1,3-диоксаны **1a,b** в синтезе N-содержащих гетероциклов и оценили влияние полученных продуктов на агрегацию тромбоцитов и плазменное звено гемостаза.

Конденсацией кетонов **1a,b** с соединениями, содержащими первичную аминогруппу, изониазидом **2a** и 2,4-динитрофенилгидразином **2b**, с количественными выходами получены новые основания Шиффа **3a, б**.



R = CH₃ (**1a, 3a, 3b**); *i*-C₃H₇ (**1b, 4a, 4b**)

Было определено влияние полученных препаратов **3a,b** и **4a,b** на антикоагуляционную и антиагрегационную активности *in vitro*. Установлено, что соединения **3a,b** и **4a,b** сокращают скорость агрегации тромбоцитов, уступая ацетилсалициловой кислоте по уровню антиагрегационной активности (до 7.4 %).

Литература

1. У.Ш. Кузьмина, Г.З., Раскильдина Д.В. Ишметова, Г.Н. Сахобутдинова, Ш.Ш. Джумаев, Ю.Г. Борисова, Ю.В. Вахитова, С.С. Злотский *Химико-фармацевтический журнал*. 2021, 55, **12**, 27-32.
2. Р.М. Султанова, Ю.Г. Борисова, Н.С. Хуснутдинова, Г.З. Раскильдина, С.С. Злотский *Известия Академии наук. Серия химическая*. 2023, 72, **10**, 2297-2318.
3. G.Z. Raskil'dina, R.M. Sultanova, S.S. Zlotskii *Rev. and Adv. in Chem*. 2023, **13**, 15–27.

«Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR – 2025-0001 «Нефтехимические реагенты, добавки и материалы».

СИНТЕЗ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ
ОКСИМОВ БИЦИКЛИЧЕСКИХ КЕТОНОВ

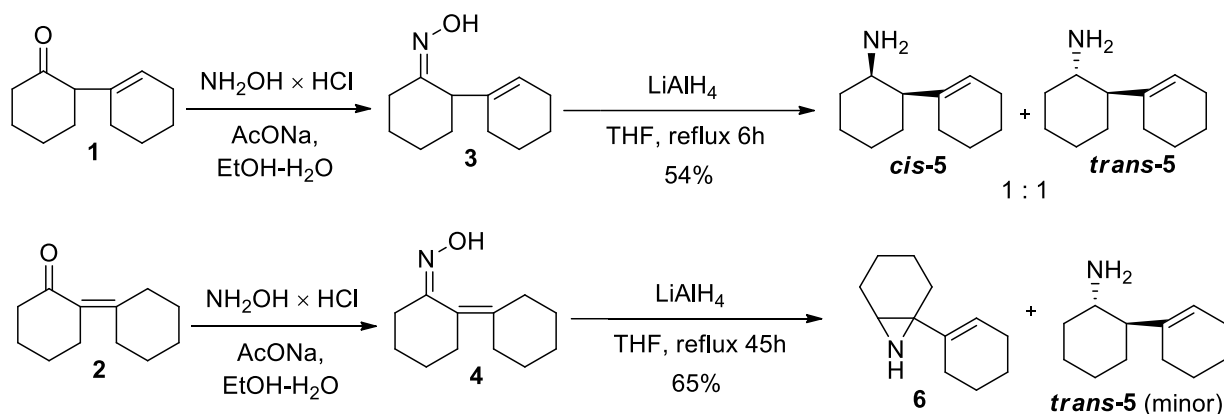
Важенин Б.В., Голованов А.А.

Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия.

e-mail: pan.bogdan2017@yandex.ru

Химические превращения оксимов карбонильных соединений приводят к разнообразным биологически- и поверхностно активным азотсодержащим соединениям [1].

В настоящей работе получены новые сведения о методах получения производных азиридина и бициклических соединений, содержащих первичную аминогруппу. Так, восстановление оксима **3** соответствующего кетона **1** обыкновенно ведет к получению первичного амина типа **5** в виде смеси двух диастереомеров с умеренным выходом. Восстановление алюмогидридом лития сопряженного оксима **4** в аналогичных условиях идет по пути циклизации с получением азиридинового производного **6** с выходом 65%.



Строение соединения **6** подтверждено спектрами ЯМР, а также рентгеноструктурным анализом.

Таким образом, разработан новый способ получения азотсодержащих гетероциклических соединений, содержащих бициклический фрагмент, а также изучены закономерности восстановления бициклических оксимов в зависимости от эндо- или экзоциклического положения кратной связи в молекуле.

Литература

1. Kotera, K.; Kitahonoki, K. Synthesis of Aziridines by Reduction of Oximes with Lithium Aluminium Hydride. A Review. *Org. Preparations Proc.* 1969, **1**, 305–324.

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА КАРБОКСИСТИРИЛПРОИЗВОДНЫХ 1,10-ФЕНАНТРОЛИНА, 2,2'-БИПИРИДИНА И ПИРИДИНА

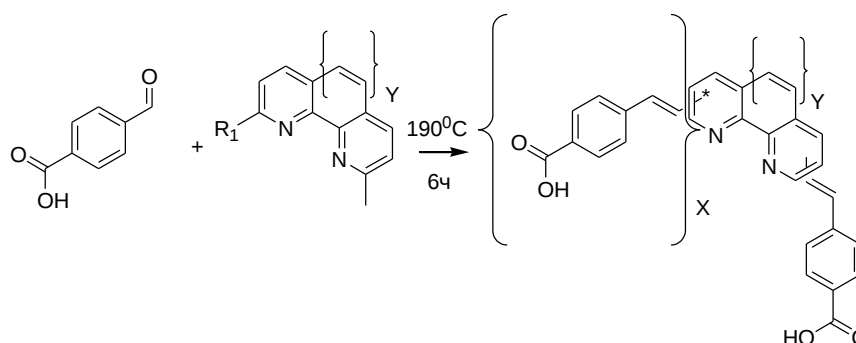
Гавришова Т.Н., Петин А.В.

ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка, Россия.

e-mail: tngavr@icp.ac.ru

Производные стирилфенантролина и стирилбипиридина обладают рядом интересных нелинейных оптических свойств, а также вызывают интерес в качестве малых молекул для селективного связывания с G-квадруплексами для возможного использования в качестве оптических зондов, в диагностике и терапии рака [1]. Особый интерес вызывают водорастворимые соединения, в частности карбоксипроизводные. Так, водорастворимый комплекс кадмия с метазамещенным карбоксистирилфенантролином обладает высокой чувствительностью и селективностью к ионам железа и бихромата, а также некоторым антибиотикам, производным нитрофурана и нитроимидазола [2].

В данной работе разработан эффективный экологически безопасный метод синтеза карбоксистирилпроизводных 1,10-фенантролина, 2,2'-бипиридина и пиридина без внешнего катализатора и растворителей реакцией конденсации 4-карбоксибензальдегида с 2,9-диметил-1,10-фенантролином, 6-метил-2,2'-бипиридином, 6,6'-диметил-2,2'-бипиридином, 4,4'-диметил-2,2'-бипиридином или 2-метилпиридином. Повышению реакционной способности метильной группы гетероцикла способствует образование водородной связи между атомом азота и карбоксильным протоном 4-карбоксибензальдегида. В случае 6,6'-диметил-2,2'-бипиридина и 4,4'-диметил-2,2'-бипиридина в основном образуются монозамещенные продукты (схема 1), а в случае 2,9-диметил-1,10-фенантролина - дизамещенный продукт. По-видимому, это связано с высокой температурой плавления и низкой растворимостью монозамещенных карбоксистирилбипиридинов. В условиях реакции (190°C, отсутствие растворителя) они находятся в кристаллической форме и не реагируют далее с 4-карбоксибензальдегидом. Это особенность позволяет получить несимметричные продукты, которые невозможно получить в других условиях реакции при наличии растворителя.



R1=Me, Y=1(фенантролин), X=1 (дипродукт); R1=Me, Y=0(бипиридин), X=0 (моноподукт); R1=H, Y=0(бипиридин), X=0 (моноподукт)

Литература

1. W. Shangrong, *Chem. Eur. J.*, 2016, **22**, 6037.
2. Z. Meng *Inorg. Chem.*, 2023, **62**, 1297.

Работа выполнена по теме Государственного задания, № государственной регистрации 124013000686-3 с использованием оборудования Аналитического центра коллективного пользования ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

НЕОБЫЧНАЯ РЕАКЦИЯ 1,2-БИС(4,6-ДИАЗИДО-1,3,5-ТРИАЗИН-2-ИЛ)ДИАЗЕНА С АЗИДОМ НАТРИЯ

Шастин А.В., Гавришова Т.Н.

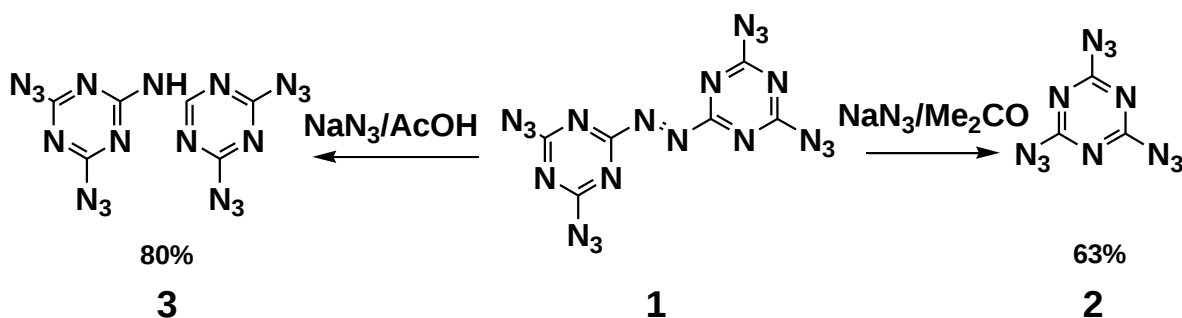
ФИЦ ПХФ и МХ РАН,

Черноголовка, Россия.

e-mail: tngavr@icp.ac.ru

1,2-бис(4,6-дiazидо-1,3,5-триазин-2-ил)дiazен (1) – экологически чистое энергоемкое соединение, полученное сравнительно недавно. Описано несколько методов его получения, исследованы его свойства, структура, определены энтальпии образования. Однако ранее ничего не было известно о его реакционной способности, кроме того, что его хлорный аналог вступает в реакции обращенного циклоприсоединения.

Мы обнаружили, что реакция 1,2-ди(4,6-дiazидо-1,3,5-триазин-2-ил)дiazена с азидом натрия в зависимости от условий проведения реакции протекает по двум разным направлениям. Реакция с азидом натрия в ацетоне приводит к образованию 2,4,6-триазидо-1,3,5-триазина (2) с выходом 63%. При реакции с азидом натрия в уксусной кислоте реакция протекает с образованием ди(4,6-дiazидо-1,3,5-триазин-2-ил)аминa (3) с выходом 80%. Отметим, что и в реакции с азидом натрия образовывались небольшие количества ди(4,6-дiazидо-1,3,5-триазин-2-ил)аминa (3), который был выделен из реакционной смеси в виде метилированного производного после метилирования метил иодидом.



Работа выполнена по теме Государственного задания, № государственной регистрации 124020100045-5 с использованием оборудования Аналитического центра коллективного пользования ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

ОСОБЕННОСТИ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ 20-ЧЛЕННЫХ МАКРОГЕТЕРОЦИКЛОВ В КРИСТАЛЛЕ

Самигуллина А.И.^а, Афанасьева К.А.^{а,б}, Кобраков К.И.^а,
Пикина А.М.^а, Гусейнов Ф.И.^{а,б}

^аФГБОУ ВО "РГУ им. А.Н. Косыгина", Москва, Россия.

^бИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия.

e-mail: samigullina@ioc.ac.ru

В данной работе исследованы конформационные особенности нового класса 20-членных макрогетероциклов, полученных при конденсации α,α -дигалоген- β -оксоальдегидов с диаминофуразаном (рис 1, а) [1]

Согласно данным РСА макроциклы в кристаллической форме существуют с различными стехиометрическими соотношениями молекул основного соединения и растворителя в независимой части элементарной ячейки, геометрия которых существенно отличается. Так, основную конформацию, наблюдаемую в кристаллах бром-производного, можно обозначить как конус (рис 1, б), в котором все ароматические фрагменты ориентированы в одном направлении, а их положения фиксируются за счет внутримолекулярных взаимодействий типа C-H...Hal. При этом размер полостей будет варьироваться в зависимости от типа реализуемой конформации.

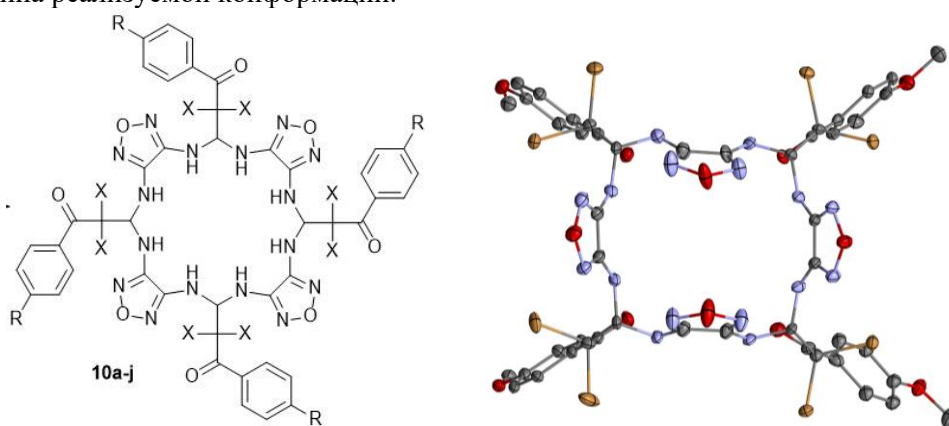


Рис. 1. Общая формула макрогетероциклов (а), геометрия молекулы бром-производного в кристалле (б).

Литература

[1] F.I. Guseinov, V.O. Ovsyannikov, E.V. Shuvalova, L.M. Kustov, K.I. Kobrakov, A.I. Samigullina, K.T. Mahmudov. *New J. Chem.*, 2024, **48**, 12869-12872.

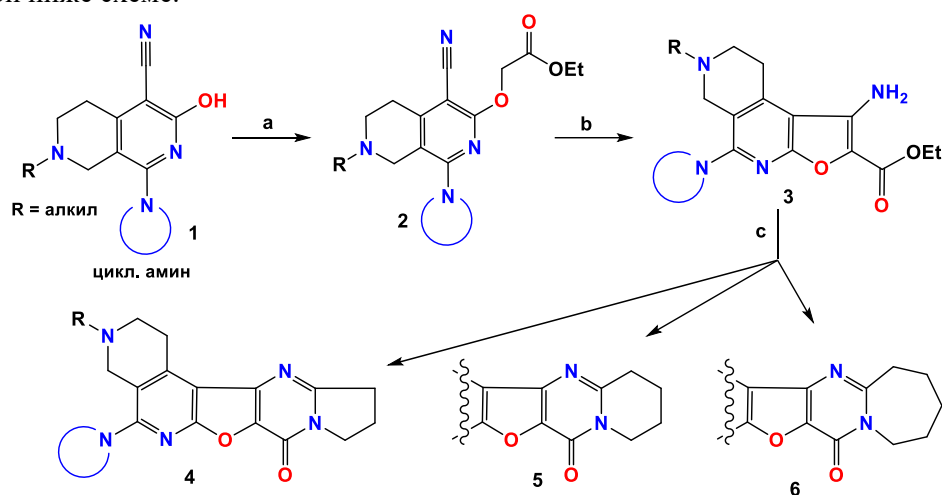
СИНТЕЗ НОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ
ФУРО[2,3-*c*]-2,7-НАФТИРИДИНОВ

Егорян А.А.^а, Сиракян С.Н.^а, Героникаки А.,^б Овакимян А.А.^а,
Акопян Э.К.^а, Джугеян А.В.^а

^аИнститут тонкой органической химии Научно-технологического центра органической и фармацевтической химии НАН РА, Ереван, Армения

^бКафедра фармацевтики, Университет Аристотеля в Салониках, 54124 Салоники, Греция
e-mail: hasmik.yegoryan@mail.ru

Конденсированные производные пирроло[1,2-*a*]пиримидинов, пиридо[1,2-*a*]пиримидинов и пиримидо[1,2-*a*]азепинов проявляют разнообразными биологическими свойствами [1,2]. В наших предыдущих работах [3,4] описан синтез и психотропные свойства ряда фуоро[3,2-*d*]пирроло[1,2-*a*]пиримидинов, фуоро[3,2-*d*]пиридо[1,2-*a*]пиримидинов и фуоро[3',2':4,5]пиримидо[1,2-*a*]азепинов. Результаты этих исследований показали, что некоторые соединения из этого ряда обладают высокими противосудорожными свойствами. Учитывая этот факт, нами был предпринят синтез соединений содержащих в своей структуре эти кольца. Синтез целевых соединений был осуществлен на основе 7-алкил-1-амино-3-гидрокси-5,6,7,8-тетрагидро-2,7-нафтиридинов **1** [5] по приведенной ниже схеме.



(a) $\text{ClCH}_2\text{COOEt}$, $\text{K}_2\text{CO}_3/\text{DMF}$, 75-80°C; (b) NaOEt , EtOH , кип.; (c) lactams, POCl_3 , $\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$, кип.

Нужно отметить, что синтезированные соединения – пирроло[1'',2'':1',2']пиримидо[4',5':4,5]фуоро[2,3-*c*]-2,7-нафтиридины **4**, пиридо[1'',2'':1',2']пиримидо[4',5':4,5]фуоро[2,3-*c*]-2,7-нафтиридины **5**, азепино[1'',2'':1',2']пиримидо[4',5':4,5]фуоро[2,3-*c*]-2,7-нафтиридины **6**, являются новыми гетероциклическими системами.

Литература

1. M. Ferrara, B. Crescenzi, M. Donghi, E. Muraglia, E. Nizi, S. Pesci, V. Summa, C. Gardelli *Tetrahedron Lett.*, 2007, **48**, 8379.
2. Y. Zhong, S.W. Krska, H. Zhou, R.A. Reamer, J. Lee, Y. Sun, D. Askin *Org. Lett.*, 2009, **11**, 369.
3. S.N. Sirakanyan, A. Geronikaki, D. Spinelli, R.G. Paronikyan, I.A. Dzbagatspanyan, I.M. Nazaryan, A.H. Akopyan, A.A. Hovakimyan *RSC Adv.*, 2016, **6**, 49028.
4. S.N. Sirakanyan, D. Spinelli, A. Geronikaki, V. Kartsev, E.K. Hakobyan, A. Petrou, R.G. Paronikyan, I.M. Nazaryan, H.H. Akopyan, A.A. Hovakimyan *Molecules*, 2021, **26**, 3320.
5. S.N. Sirakanyan, D. Spinelli, A. Geronikaki, L. Zuppiroli, R. Zuppiroli, V. Kartsev, E.K. Hakobyan, H.A. Yegoryan, A.A. Hovakimyan *Inter. J. Mol. Sci.*, 2022, **23**, 5904.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА в рамках научного проекта № 21AG-1D036.

СЕМЕЙСТВО НОВЫХ ПОЛИАРОМАТИЧЕСКИХ ФОСФОКУМАРИНОВ:
НЕОЖИДАННАЯ КИСЛОТНОСТЬ

Залалтдинова А.В.^а, Иваненко Т.Ю.^{б,в}, Герасимова М.П.^д, Садыкова Ю.М.^а, Левандовский В.В.^{б,д},
Газизов А.С.^а, Бурилов А.Р.^а, Лутошкин М.А.^б

^а ИОФХ им. А.Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

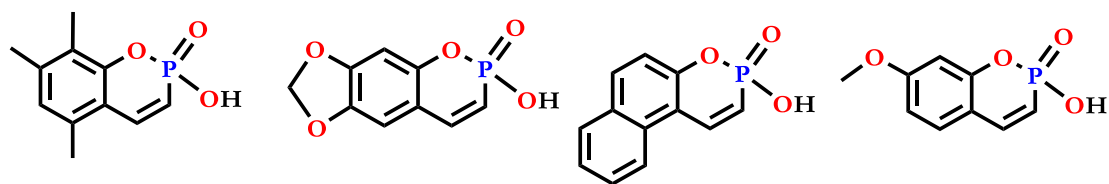
^б Институт химии и химической технологии СО РАН, Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН», Красноярск, Россия

^в Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия

^д Институт физики им. Л.В. Киренского, Красноярск, Россия

e-mail: azalaltdinova@mail.ru

Нами изучены кислотнo-основные, структурные, оптические и люминофорные свойства серии из четырех новых 1,2-оксафосфинановых лигандов с использованием комплекса физико-химических методов и квантово-химического моделирования. Новые фосфорорганические лиганды были синтезированы путем конденсации 2-этоксивинил дихлорфосфоната с 2,3,5-триметилфенолом, сезамолом, 2-нафтолом и 3-метоксифенолом [1,2]. Все изученные соединения демонстрируют выраженные спектрально-люминесцентные характеристики и показывают отличную растворимость в водных средах. Спектры люминесценции показывают максимальное излучение в области 350-400 нм. Спектры поглощения демонстрируют разнообразие электронных переходов в области 220-340 нм. При исследовании кислотнo-основных процессов было показано неожиданное поведение изученных лигандов: определенные константы диссоциации (рКа) лежат в диапазоне от 0 до 1,3 отрицательных логарифмических единиц. Полного подавления диссоциации не удалось достичь даже в концентрированной соляной кислоте, что ставит эти соединения в ряды сильных минеральных кислот. Оценки спектральных и кислотнo-основных свойств проводились с использованием моделирования DFT с использованием явных и неявных моделей сольватации.



Литература

1. Y. M. Sadykova, L. M. Sadikova, A. R. Badrtdinova, A. B. Dobrynin, A. R. Burilov, M. A. Pudovik *Phosphorus. Sulfur. Silicon Relat. Elem.*, 2015, **190**, 2267.
2. Yu. M. Sadykova, N. V. Dalmatova, Y. K. Voronina, A. R. Burilov, M. A. Pudovik, O. G. Sinyashin *Heteroatom Chem.*, 2012, **23**, 340.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 25-73-20015, <https://rscf.ru/en/project/25-73-20015>).

ДИАЗОПРОИЗВОДНЫЕ АЗОГЕТЕРОЦИКЛОВ: НОВЫЕ ПОДХОДЫ
К СИНТЕЗУ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ

Зыкова Д.А.^а, Непочатый Г.Д.^а, Степаков А.В.^{а,б}

^аСанкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), кафедра органической химии

^бСанкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
e-mail: zikovadascha@yandex.ru

Дiazосоединения представляют собой важный класс органических молекул, обладающих высоким синтетическим потенциалом. Они находят широкое применение в реакциях генерирования карбенов, а также в синтезе гетероциклических, спироциклических и других структурно сложных соединений. Особый интерес представляют диазопроизводные, содержащие метиленовую группу в α -положении к гетероциклу, кислотность таких СН-групп понижена по сравнению с классическими СН-кислотами, что существенно усложняет процесс диазопереноса.

В ходе работы нами были синтезированы новые гетероциклические диазопроизводные, включая триазольные и тиadiaзольные структуры (Рис. 1). Для оптимизации условий диазопереноса исследовались различные методы. Проведение реакции в метаноле с использованием триэтиламина [1] в качестве основания не давало результатов, при использовании метилата натрия выход соединения **2б** составил только 15%, а образование тиadiaзольного диазосоединения **5** в этих условиях не наблюдалось вовсе. При двухфазном методе (бензол, тетрабутиламмоний бромид, водный раствор гидроксида натрия) [2] выход соединения **3б** составил 29%, тогда как образование соединения **5** не происходило. Лучшие результаты в реакции диазопереноса, с выходом до 51%, были достигнуты при взаимодействии соединений **1** и **4** с тозилазидом в присутствии диазабициклоундецена (DBU) в ацетонитриле [3]. Для соединения **2б** в дальнейшем была проведена фотохимическая реакция ($\lambda = 440$ нм, 16 ч, сухой ацетонитрил), в результате чего было получено соединение **3б**. Проведение аналогичной реакции для соединения **5** привело к образованию сложной смеси продуктов.

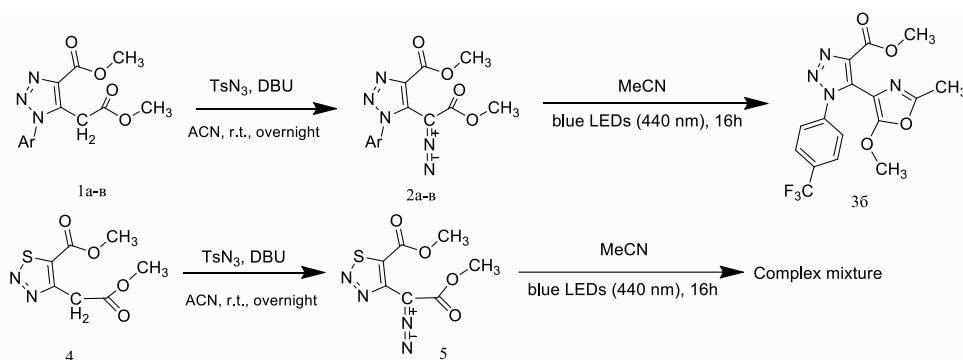


Рисунок 1 – Схема синтеза полученных соединений. (а)-фенил, (б)-пара- CF_3 -фенил, (в)-орто-нитро-фенил

Литература

- [1] Deadman B. et al. The development of a scalable continuous diazo transfer process. *Org Biomol Chem*. 2016.
- [2] Gerrit L'abbé; Wim Dehaen: *Synthesis and Thermolysis of 4-Methoxycarbonyl-5-(α -Methoxycarbonyldiazomethyl)-1, 2, 3-Triazoles*, 1987, 823–824.
- [3] Chuprakov S, et al. Direct palladium-catalyzed arylation of cyclopropenes. *J Am Chem Soc*. 2005

СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ СПИРОХРОМАН-2,4'-ПИРИМИДИНОВ

Карандеева А.С., Богданова Н.А., Чиркова Ж.В.

Ярославский государственный технический университет,

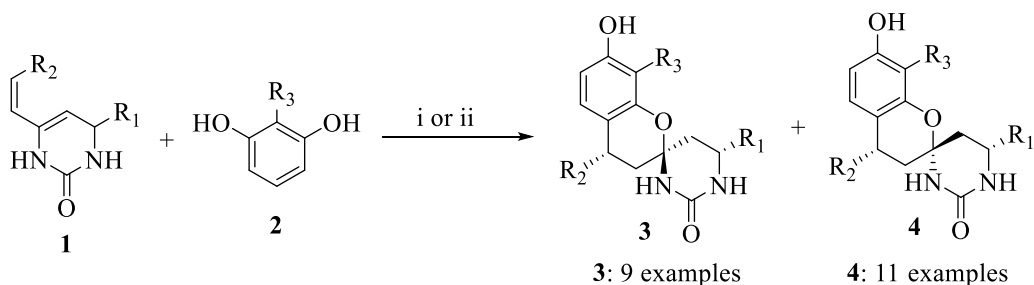
ИХиХТ, Ярославль, Россия

E-mail: karandeeva.alyona@yandex.ru

Спирогетероциклы, содержащие в своем составе хромановый и пиримидиновый фрагменты [1], представляют собой важный класс органических соединений, обладающих разнообразной биологической активностью [2].

Представленное исследование направлено на разработку диастереоселективного метода синтеза спирохроман-2,4'-пиримидинов. Было исследовано взаимодействие замещенных 6-стирил-4-арилдигидропиримидин-2-онов **1** с замещенными резорцинами **2**. Синтез проводился в хлороформе, в присутствии каталитических количеств метансульфоновой или толуолсульфоновой кислоты.

В процессе работы были успешно подобраны условия селективного получения диастереомеров **3** и **4**, которые также удавалось разделить путем перекристаллизации в этилацетате.



i: CHCl_3 , H_2O , $p\text{-TsOH}$; ii: CHCl_3 , CH_3COOH , $\text{CH}_3\text{SO}_3\text{H}$

Схема 1. Синтез замещенных спирохроман-2,4'-пиримидинов

Строение синтезированных соединений **3** и **4** установлено на основании совокупности данных ИК-, ЯМР-спектроскопий, масс-спектрометрии и РСА.

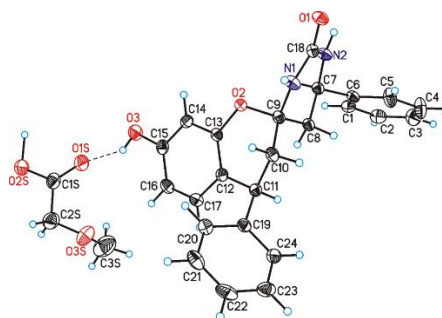


Рисунок 1. Структура соединения **4**, полученная на основании данных РСА, 50% эллипсоиды.

Литература

1. A. S. Karandeeva, A. M. Uryadova, E. S. Makarova, M. V. Kabanova, S. I. Filimonov, Z. V. Chirkova, K. Y. Suponitsky. *Mendeleev Commun.* 2023, **33**(6), 779-781.
2. T. Koshizawa, T. Morimoto, G. Watanabe, T. Fukuda, N. Yamasaki, S. Hagita, Y. Sawada, A. Okuda, K. Shibuya, T. Ohgiya. *Bioorg. Med. Chem. Let.* 2018, **28**(19), 3236-3241.

СИНТЕЗ ЭФИРОВ 3,4-ДИАРИЛИЗОКСАЗОЛ-5-КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ В КАЧЕСТВЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ РТРВ ФОСФАТАЗЫ

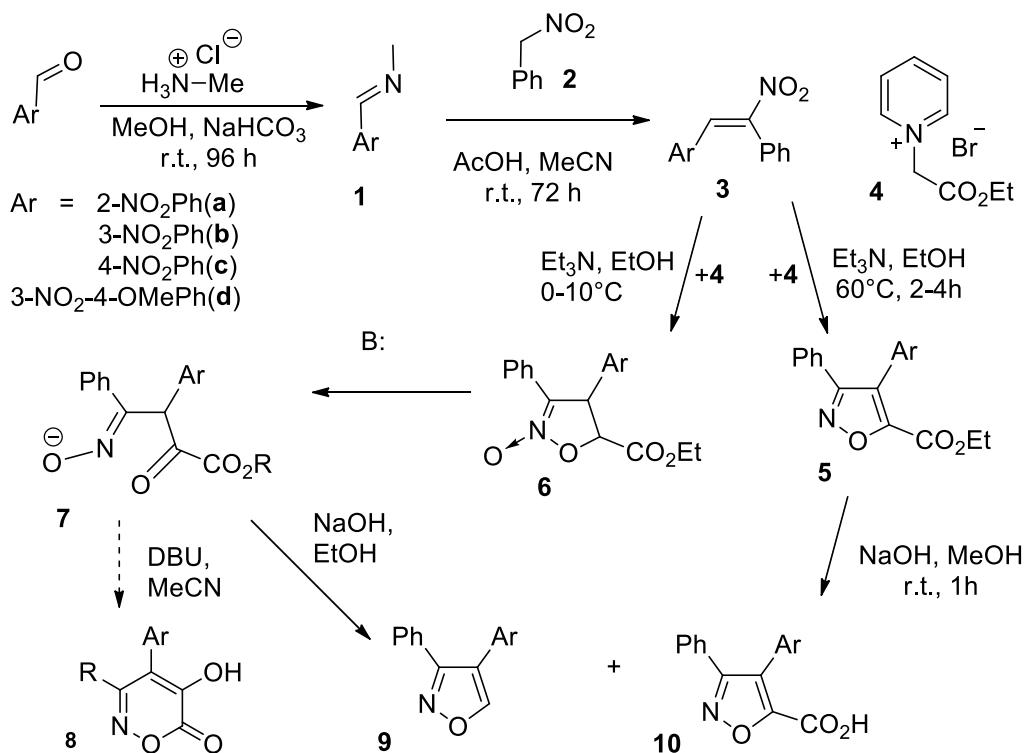
Коблов И.А., Семенов К.А., Кислый В.П., Семенов В.В.

Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН, Москва, Россия.

e-mail: koblov.nacl@yandex.ru

Хорошо известно, что туберкулез вызывает около 1.7 млн смертей и 10.4 миллиона новых случаев заражения ежегодно [1]. Протеинтирозинфосфатаза В(РТРВ) *M. tuberculosis* рассматривается как одна из мишеней в разработке препаратов против MDR-штаммов туберкулеза. Ранее анти-РТРВ активность была установлена для 4,5-диарилизоксазол-3-карбоновых кислот [1]; 3,4-диарилизоксазол-5-карбоновые кислоты не тестировались на антитуберкулезную активность.

В случае циклоконденсации альфа-нитростильбенов **3**, содержащих нитрогруппу в арильном фрагменте, с солью пиридиния **4** при 60 °С образуются исключительно эфиры изоксазол-5-карбоновых кислот **5**, которые затем были гидролизованы до кислот **10**. При $T < 10$ °С основными продуктами оказываются изоксазол N-оксиды **6**.



Интересно отметить, что N-оксиды **6** не являются интермедиатами при образовании эфиров **5**. При действии сильных оснований, N-оксиды **6** претерпевают электроциклическое раскрытие и продуктами могут являться 5-гидрокси-1,2-оксазин-6-оны **8** [2], или, в случае действия NaOH, образуются как 3,4-диарилизоксазолы **9**, так и изоксазол-5-кислоты **10**. Полученные соединения **9**, **10** переданы на испытания на антитуберкулезную активность.

Литература

1. V. Makarov, E. Salina, R.C. Reynolds, P.P. Kyaw Zin, S. Ekins, *J. Med. Chem.*, 2020, 63, 8917
2. A.S. Maksimenko, V.P. Kislyi, N.B. Chernysheva, Y.A. Strelenko, Y.V. Zubavichus, V.N. Khrustalev, M.N. Semenova, V.V. Semenov *Eur. J. Org. Chem.* 2019, 4260.

НЕТРИВИАЛЬНАЯ ВОССТАНОВИТЕЛЬНАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА 3-ЦИАНОКЕТОНОВЫХ ПРЕДШЕСТВЕННИКОВ, ПРИВОДЯЩАЯ К 3-ИНДОЛИЛАЦЕТАМИДАМ

Аксенов А.В., Кузьминов И.К., Аксенов Д.А., Аксенов Н.А.

Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь
Kuza05Kuza@mail.ru

В данной работе исследованы особенности реакционной способности 4'-H-спиро[индол-3,5'-изоксазолов] и 2-(3-оксоиндолин-2-ил)ацетонитрилов с NaBH_4 в этаноле. Показана схема протекания реакции, открывающая доступ к соответствующим 3-индолилацетамидам, обладающих противоопухолевой активностью по отношению к глиобластоме и другим культурам раковых клеток. Помимо противоракового потенциала, 3-индолилацетамиды могут быть получены из 4'-H-спиро[индол-3,5'-изоксазолов] или 2-(3-оксоиндолин-2-ил)ацетонитрилов с сопоставимыми хорошими выходами. На схеме 2 показан предполагаемый механизм данной реакции и превращение циано-группы в амид через образование 2-имино-2,3,3a,8b-тетрагидрофуро[3,2-b]индол-4-идным промежуточным соединениям.

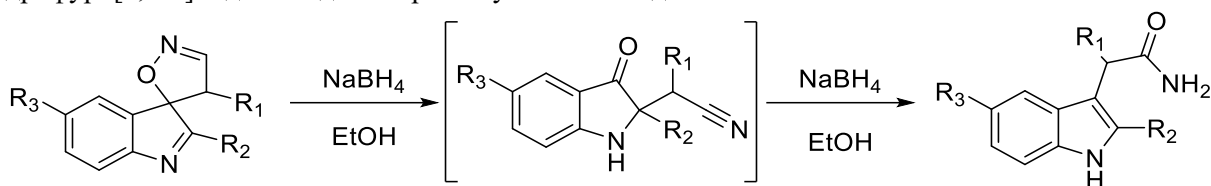


Схема 1. Предполагаемая схема протекания реакции образования 3-индолилацетамидов.

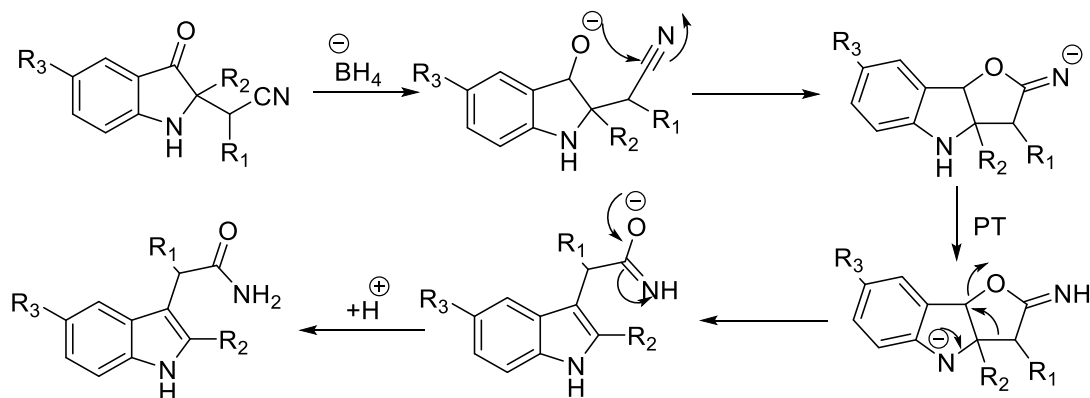


Схема 2. Предполагаемый механизм образования 3-индолилацетамидов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73- 20051;
<https://rscf.ru/project/21-73-20051/>

ГЕТЕРОАРОМАТИЧЕСКИЕ АЗИНИЛГИДРАЗОНЫ
В СИНТЕЗЕ ТЕТРАКООРДИНИРОВАННЫХ БОРНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Лавринченко Ю.А.^а, Лежнина М.А.^а, Утепова И.А.^{а,б}, Чупахин О.Н.^{а,б}

^аУральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия.

^бИнститут органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,
Екатеринбург, Россия
e-mail: paznikova.ja@gmail.com

Азинилгидразоны представляют значительный интерес благодаря превосходной способности образовывать комплексы с металлами. Тетракоординированные борные комплексы азинилгидразонов зачастую обладают ярко выраженной физиологической активностью, проявляют интенсивную флуоресценцию и могут быть использованы в качестве люминесцентных материалов. Включение различных фрагментов в структуру гидразона позволяет тонко настраивать оптические и физико-химические свойства комплексов для специальных целей.

В ходе исследований был разработан метод синтеза тетракоординированных борных комплексов на основе гетероароматических азинилгидразонов, содержащих в своей структуре тиофеновые фрагменты, путем промотируемой основаниями циклизации соответствующих гидразонов с соответствующими борпроизводными (см. схему).

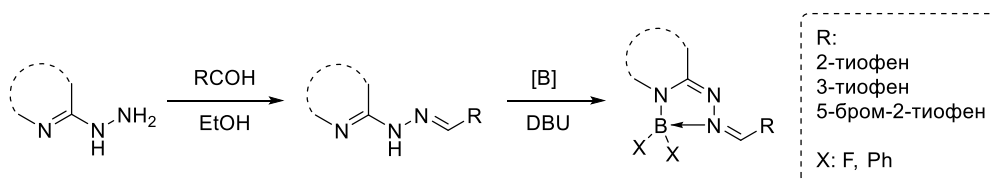


Схема синтеза борных комплексов гетероароматических азинилгидразонов

В настоящее время изучаются оптические свойства синтезированных в ходе исследовательской работы новых тетракоординированных комплексов бора на основе гетероароматических азинилгидразонов.

АЛЬТЕРНАТИВНЫЕ ГЕТЕРОГЕННЫЕ КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ CuFe_2O_4 ДЛЯ РЕАКЦИЙ ОБРАЗОВАНИЯ C-N СВЯЗЕЙ

Малышева А.С.^{а,б}, Малышев С.А.^б, Аверин А.Д.^б, Шляхтин О.А.^б

^аУниверситет МГУ-ППИ в Шэньчжэне, Химический факультет, Шэньчжэнь, Китай.

^бМосковский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия.

e-mail: annette9513@yandex.ru

Каталитическое аминирование представляет собой одну из наиболее востребованных реакций в современном органическом синтезе, позволяющую получать широкий спектр ценных соединений. Традиционно используемые гомогенные палладиевые катализаторы, несмотря на высокую активность, обладают существенными недостатками, включая высокую стоимость и сложность выделения продуктов реакции. В связи с этим перспективным направлением является разработка гетерогенных каталитических систем на основе более доступной меди [1].

В данной работе исследована возможность применения медьсодержащих металлооксидных нанокмполитов для каталитического аминирования арилгалогенидов с образованием C-N связи. Катализаторы синтезировали путем восстановительного разложения сложного оксида CuFe_2O_4 (Рис.1) в токе водорода при температурах 250 и 350°C, получив соответственно композиты CF-250 и CF-350. В качестве модельных субстратов использовали йодбензол, его производные и 2-йодпиридин, а в качестве амина - н-октиламин. Исследования показали, что наибольшие выходы продуктов аминирования (до 80%) достигаются при использовании нанокмполитов CF-250 и CF-350. Дополнительно проведено сравнение эффективности различных медьсодержащих каталитических систем.

Полученные результаты демонстрируют перспективность использования разработанных медьсодержащих нанокмполитов в качестве альтернативы традиционным палладиевым катализаторам для реакций аминирования. Особое значение имеет возможность многократного использования катализатора и простота выделения продуктов реакции, что делает процесс более экономичным и экологически безопасным.

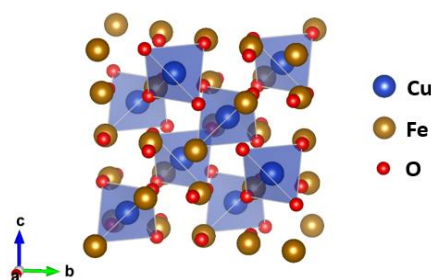
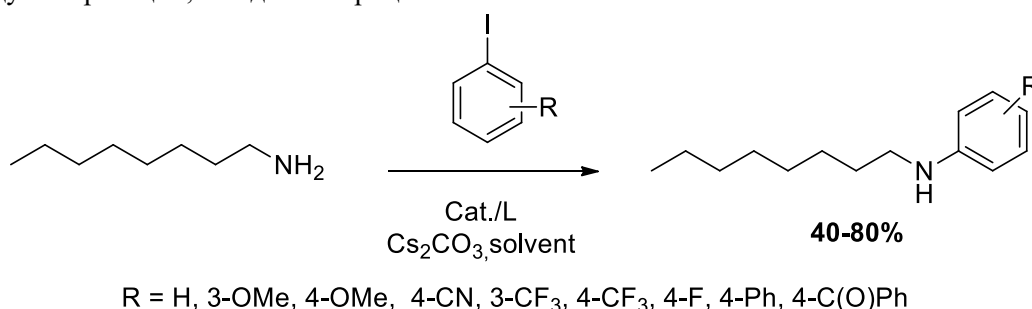


Рис.1 Кристаллическая структура шпинели CuFe_2O_4

Литература

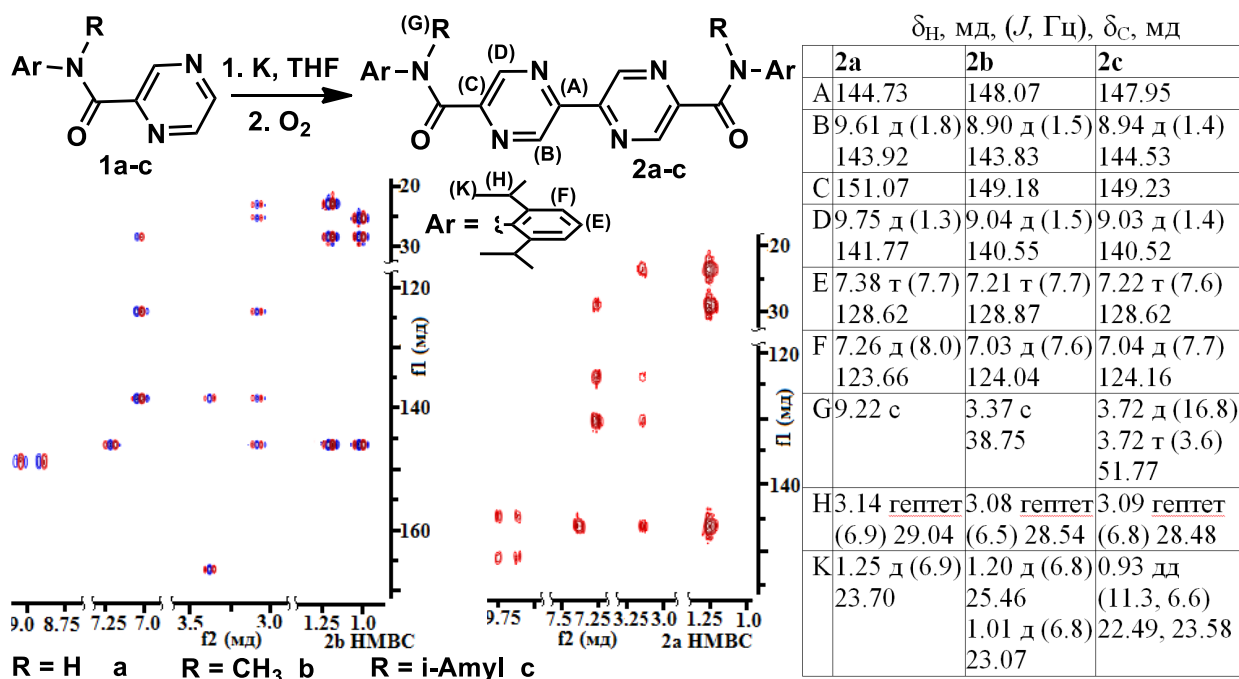
1. A. Murashkina, D. Kuliukhina, A. Averin, A. Abel, E. Savelyev, B. Orlinson, I. Novakov, C. Correia, I. Beletskaya *Mendeleev Commun.*, 2022, **32**, 91.

АМИДЫ [2,2'-БИПИРАЗИН]-5,5'-ДИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Маркин Г.В., Кетков С.Ю., Беликов А.А., Забродина Г.С.,
Ковылина Т.А., Каткова М.А.

Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева РАН,
Нижний Новгород, Россия.
e-mail: mag@iomc.ras.ru

N-(2,6-диизопропилфенил)пиразин-2-карбоксамид (**1a**), N-(2,6-диизопропилфенил)-N-метилпиразин-2-карбоксамид (**1b**) и N-(2,6-диизопропилфенил)-N-изопентилпиразин-2-карбоксамид (**1c**) реагируют с K в ТГФ образуя в осадке красные соли, которые окисляются воздухом в N⁵,N^{5'}-бис(2,6-диизопропилфенил)-[2,2'-бипиразин]-5,5'-дикарбоксамид (**2a**), N⁵,N^{5'}-бис(2,6-диизопропилфенил)-N⁵,N^{5'}-диметил-[2,2'-бипиразин]-5,5'-дикарбоксамид (**2b**), и N⁵,N^{5'}-бис(2,6-диизопропилфенил)-N⁵,N^{5'}-диизопентил-[2,2'-бипиразин]-5,5'-дикарбоксамид (**2c**). Амиды **2a-c** очищены перекристаллизацией из метанола. Масс спектры **2a-c** содержат молекулярные ионы m/z ($I_{\text{отн}}$, (%)): 564 [M_{2a}]⁺ (100), 592 [M_{2b}]⁺ (100), 704 [M_{2c}]⁺ (20), осколки 521 [$M_{2a} - i\text{-Pr}$]⁺ (30), 549 [$M_{2b} - i\text{-Pr}$]⁺ (90), 661 [$M_{2c} - i\text{-Pr}$]⁺ (22) и ион с массой 218 относящийся к остатку [2,2'-бипиразин]-5,5'-дикарбоксамид.



Расщепления сигналов двух пиразиновых протонов у **2a-c** (CDCl_3) лежат в интервале 1.3 – 1.8 Гц. Это исключает орто положение как положение димеризации. В HMBC спектрах каждый пиразиновый протон дает два кросспика, особенно четко наблюдающиеся у **2a**. Во всех случаях атомы углерода, дающие HMBC кросспики с пиразиновыми протонами, не связаны с ними непосредственно. Это может быть только в том случае, если пиразиновые протоны максимально удалены друг от друга. Значит положение димеризации – пара положение относительно карбоксильной группы.

Поддержка РФФ 23-13-00139 и «Аналитический центр ИМХ РАН».

СИНТЕЗ НОВЫХ ТЕРАПЕВТИЧЕСКИХ АГЕНТОВ НА ОСНОВЕ КАРБОРАНОВ, АФФИННЫХ К БЕЛКУ АКТИВАЦИИ ФИБРОБЛАСТОВ

Волкова Н.С., Мачулкин А.Э.

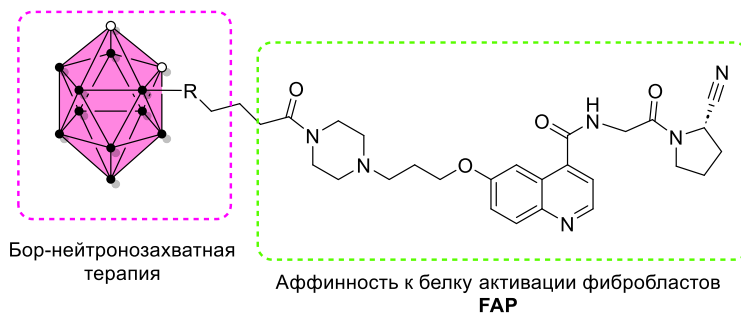
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия.
e-mail: nata.dashkova1996@mail.ru

На сегодняшний день в современной медицине среди всех методов терапии и диагностики злокачественных заболеваний наиболее удобным является метод направленной доставки лекарственного препарата или визуализирующего агента. Данный метод основан на использовании молекул, специфично связывающихся с определенным рецептором или компонентом микроокружения опухоли, не затрагивая при этом здоровые ткани.

Наиболее интересной и перспективной мишенью из компонентов микроокружения опухоли является белок активации фибробластов, чья сверхэкспрессия наблюдается более чем в 90% эпителиальных опухолей. Высокую аффинность к белку активации фибробластов проявляют молекулы, содержащие в своем составе фрагменты хинолина и 2-цианопирролидина или 2-пирролидинборановой кислоты. Их модификация и комбинация с другими мишенями или визуализирующими фрагментами позволяет создавать новые терапевтические и диагностические агенты.[1]

Бор-нейтронозахватная терапия является перспективным инструментом в современной медицинской химии для лечения опухолей головного мозга, головы и шеи, на которые трудно воздействовать иными способами. Данный метод представляет собой высокоэффективный вид лучевой терапии, при котором не затрагиваются здоровые ткани.[2] Перспективным источником бора являются карбораны, которые являются основой медицинских препаратов широкого спектра действия.

Таким образом, в данной работе представлен синтез новых терапевтических агентов на основе карборанов и FAPI-02, имеющего высокую аффинность к белку активации фибробластов и выступающего в качестве вектора для направленной доставки терапевтического агента. Приведена 18-стадийная синтетическая схема и ее оптимизация по получению FAPI-02, а также дальнейший синтетический путь для получения конечных соединений с фрагментом карборанов.



Литература

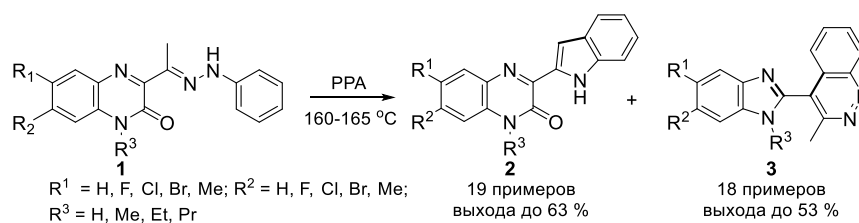
1. J.S.Byun, K.Gardner *Am. J. Pathol.*, 2013, **182**, 1055.
2. Y.Chen, F.Du, L.Tang, J.Xu, Y.Zhao, X.Wu, M.Li, J.Shen, Q.Wen, C.H.Cho, Z.Xiao *Molecular Therapy: Oncolytics*, 2022, **24**, 400.

**КОНКУРЕНЦИЯ ПЕРЕГРУППИРОВКИ ФИШЕРА И МАМЕДОВА
В СИНТЕЗЕ 3-(ИНДОЛ-2-ИЛ)ХИНОКСАЛИН-2-ОНОВ
И 4-(БЕНЗИМИДАЗОЛ-2-ИЛ)-3-МЕТИЛ(АРИЛ)ЦИННОЛИНОВ
ИЗ 3-(МЕТИЛ/АРИЛ(2-ФЕНИЛГИДРАЗОНО)МЕТИЛ)ХИНОКСАЛИН-2-ОНОВ В
ПОЛИФОСФОРНОЙ КИСЛОТЕ**

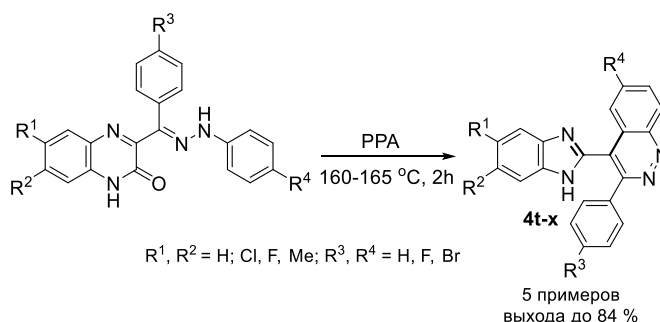
**Мустакимова Л.В., Сякаев В.В., Галимуллина В.Р., Ризванов И.Х.,
Губайдуллин А.Т., Синяшин О.Г., Мамедов В.А.**

*Институт органической и физической химии имени А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН, лаборатория химии
гетероциклических соединений, Казань, Россия.
e-mail: mustakimova@iopcr.ru*

Разработан новый доступный метод синтеза представителей биологически важных классов соединений – индолов и циннолинов, а на их основе фармакологически ценных бигетероциклических систем – 3-(индол-2-ил)хиноксалин-2-онов и недоступных иными способами 4-(бензимидазол-2-ил)-3-метил(арил)циннолинов. Синтез этих бигетероциклических систем включает в себя две различные конкурирующие перегруппировки 3-(метил(2-фенилгидразон)метил)хиноксалин-2-онов: [3,3]-сигматропную перегруппировку Фишера [1] с формированием индольного кольца и образованием 3-(индол-2-ил)-хиноксалин-2-онов и перегруппировку Мамедова [2] с одновременным построением бензимидазольного и циннолинового колец с образованием новой бигетероциклической системы – 4-(бензимидазол-2-ил)-3-метилциннолинов.



Замена метильной группы в гидразонной части исходных соединений на арильную сводит конкуренцию на нет и единственным продуктом реакций становятся 4-(бензимидазол-2-ил)-3-арил)циннолины [3].



Литература

1. B.P. Mundy, M.G. Ellerd, F.G. Favaloro. *Name Reactions and Reagents in Organic Synthesis*, 2nd Ed.; Wiley: New York, 2013, 346.
2. A. Hassner, I. Namboothiri. *Organic Syntheses Based on Name Reactions*, 3rd Ed.; Elsevier: Amsterdam, 2012, 299-300.
3. V.A. Mamedov, L.V. Mustakimova, Z.-W. Qu, H. Zhu, V.V. Syakaev, V.R. Galimullina, L.R. Shamsutdinova, I.Kh. Rizvanov, A.T. Gubaidullin, O.G. Sinyashin, S. Grimme *J. Org. Chem.*, 2023, **88**, 1864-16890.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00098.
Физико-химические исследования проведены в ЦКП-САЦ ФИЦ КазНЦ РАН.*

СИНТЕЗ 6-МЕТИЛТИО-2-АРИЛПИРАЗОЛО[3,4-*d*]ПИРИМИДИНОВ

Официрова Е.С., Шкляренко А.А., Мызников Л.В.

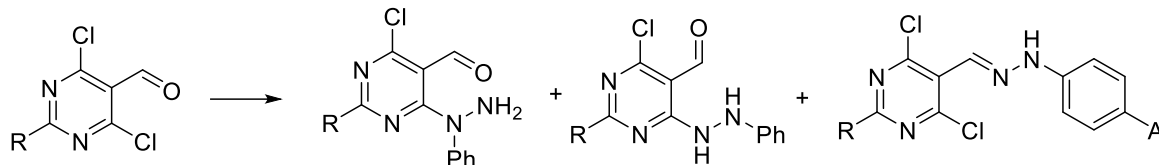
Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)

Санкт-Петербург, Россия.

e-mail: Ofizerovaes@mail.ru

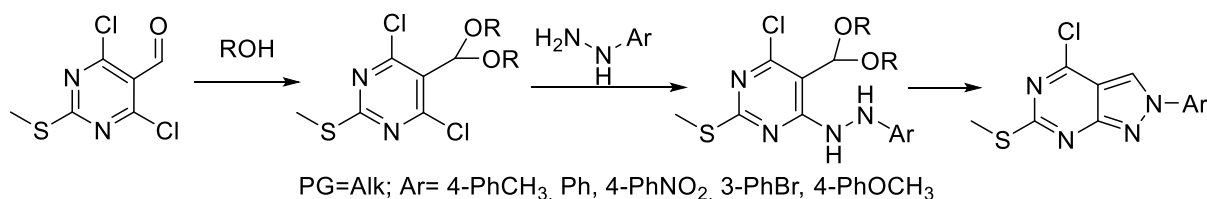
Пиразоло[3,4-*d*]пиримидины привлекают большое внимание в разработке лекарственных средств. Благодаря своей структурной близости к природным пуринам, эти соединения обладают широким спектром биологической активности [1-3]. Относительно мало изученными остаются 6-*R*-тиопроизводные указанных соединений, однако и среди них найдены соединения, проявляющие высокую анальгезирующую активность [4].

Один из наиболее удобных путей синтеза пиразоло[3,4-*d*]пиримидинов заключается в реакции 4,6-дихлорпиримидин-5-карбальдегидов с арилгидразинами. Селективность этой реакции сильно зависит от заместителя на ароматическом кольце гидразина и, по-видимому, определяется относительной нуклеофильностью атомов азота гидразина, которая контролирует последовательность взаимодействия пиридина с 4,6-дихлорпиримидин-5-карбальдегидом:



В случае донорного заместителя в результате реакции как правило могут быть получены 1-арилпиразоло[3,4-*d*]пиримидины с примесью 2-изомера. В случае акцепторных заместителей вместо ожидаемых пиразолопиримидинов образуются незаключенные гидразоны.

Мы предположили, что увеличение селективности реакции можно достичь за счет защиты альдегидной группы, в результате чего на первой стадии реакции исключается возможность образования основания гидразонов. Действительно, на примере реакции 4,6-дихлор-2-(метилтио)пиримидин-5-карбальдегида с арилгидразинами мы нашли, что последовательность реакций, включающая защиту альдегидной группы, взаимодействие с арилгидразином и последующее снятие защитной группы приводит исключительно к 6-(метилтио)-4-хлор-2-арилпиразоло[3,4-*d*]пиримидинам.



Предложенная методика является простой в исполнении, хотя промежуточные продукты могут быть выделены и подвергнуты очистке, в большинстве случаев для получения целевого соединения этого не требуется. 6-(Метилтио)-4-хлор-2-арилпиразоло[3,4-*d*]пиримидины были выделены с хорошими выходами.

Литература

1. Tarik El-Sayed Ali *Eur. J. Med. Chem.*, 2009, **44**, 4385.
2. J.A. Markwalder *J. Med. Chem.*, 2004, **47**, 5894.
3. S. Gupta *Eur. J. Med. Chem.*, 2008, **43**, 771.
4. Е.С. Официрова, Л.Н. Алексеева, А.А. Шкляренко *Вестник Смоленской государственной академии*, 2020, **19**, 46.

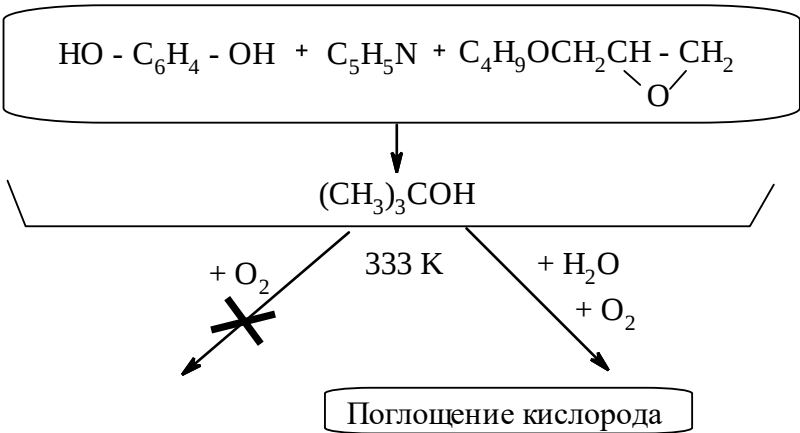
ОКИСЛЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫМ КИСЛОРОДОМ ТРОЙНОЙ СИСТЕМЫ БУТИЛГЛИЦИДИЛОВЫЙ ЭФИР – ГИДРОКИНОН – ПИРИДИН В РАСТВОРЕ ВОДНОГО ТРЕТ.БУТАНОЛА

Психа Б.Л., Петров Л.В., Соляников В.М.

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка, Россия.

e-mail: plv@icp.ac.ru

Изучена кинетика поглощения кислорода тройной синергетической системой (ТрС) бутилглицидиловый эфир (БГЭ) – гидрохинон (ГХ) – пиридин (Рy) в растворе водного трет.бутанола при соотношении t-BuOH : H₂O = (80 : 20) % об. и температуре 333 К.



В отсутствие воды система не окисляется, как и тройная система (эпоксид стирола – гидрохинон - пиридин) [1]. С увеличением концентрации воды растет скорость и уменьшается период индукции окисления. Скорость поглощения O_2 прямо пропорциональна концентрациям эпоксиды и пиридина, который в ходе окисления не расходуется.

Изучение в барботажном реакторе расходования БГЭ, ГХ и накопления бензохинона (БХ) подтвердило сложный механизм превращения БГЭ в ходе окисления: гидрохинон расходуется, но БХ является промежуточным продуктом его превращения, накапливаясь вначале и быстро расходуясь в ходе опытов. Скорость расходования БГЭ прямо пропорциональна концентрации БГЭ. Соотношение скоростей поглощения кислорода и убыли эпоксида $V_{O_2}/V_{BGE} \approx 2,5$. Для объяснения необычно большой величины этого отношения предложен механизм с участием в окислении лабильного заместителя $C_4H_9OSn_2$ при оксиановом цикле БГЭ: окисление заместителя предположительно протекает как внутримолекулярная радикальная реакция.

Литература

1. Петров Л.В., Психа Б.Л., Соляников В.М. *Химическая безопасность/Chemical safety science*. 2024, **8**, (2), 128-139.

Работа выполнена по теме Государственного задания: (124020500064-2).

СИНТЕЗ ПИРИДАЗИНОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ФРАГМЕНТАМИ БИОМОЛЕКУЛ И БИОАКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

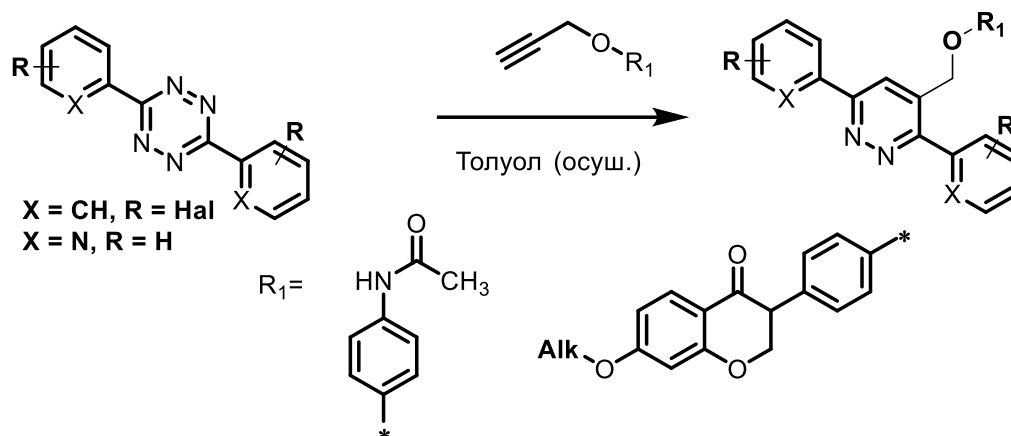
Платонов В.А.^а, Петрова В.Е.^а, Ковалев И.С.^а, Копчук Д.С.^{а,б}, Зырянов Г.В.^{а,б}

^аУральский Федеральный Университет, Россия, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

^бИнститут Органического Синтеза, Уральское Отделение РАН, Россия, 620219, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 22, ГСП-147, Факс: (343) 3741189
e-mail: vyplatonov@mail.ru

Пиридазины широко представлены в лекарственных препаратах с различными типами биологической активности [1]. Особое внимание привлекает использование производных пиридазина в качестве противораковых препаратов с различными механизмами действия, подавляющих развитие паталогических процессов на различных стадиях [2-3]. Перспективным является использование пиридазинов в качестве радиосенсилайзеров для противоопухолевой терапии [4]. Кроме того, производные пиридазинов используются для создания термостойких и огнестойких полимерных материалов.

В рамках натеящего сообщения описан метод получения пиридазинов, соедержащих в составе биомолекулы и фрагменты лекарственных препаратов. Так, взаимодействие 3,6-бис(гет)арил-замещенных 1,2,4,5-тетразинов с пропаргиллокси-замещенными (гет)аренами в толуоле при нагревании одностадийно приводит к целевым продуктам с выходами от умеренных до высоких.



Литература

1. Z.-Q. Liu, Q. Zhang, Y.-L. Liu, X.-Q. Yu, R.-H. Chui, L.-L. Zhang, B. Zhao, L.-Y. Ma *Bioorg. Med. Chem.*, 2024, **111**, 117847.
2. M. Li, Y. Wang, M. Li, X. Wu, S. Setrerrahmane, H. Xu *Acta Pharm. Sinica B*, 2021, **11(9)**, 2726.
3. Z.-X. He, Y.-P. Gong, X. Zhang, L.-Y. Ma, W. Zhao *Eur. J. Med. Chem.*, 2021, **209**, 112946.
4. S.P. Yurekha, D. Gupta *Radiation Phys. Chem.*, 2025, **232**, 112655.
5. M. Wu, K. Yang, Y. Li, J. Rong, D. Jia, Z. Jia, K. Naito, X. Yu, Q. Zhang *Polymers*, 2022, **14(19)**, 4144.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант 25-73-30016).

СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ
4-АРИЛ-5-ГИДРОКСИМЕТИЛ-6-СТИРИЛДИГИДРОПИРИМИДИНОВ

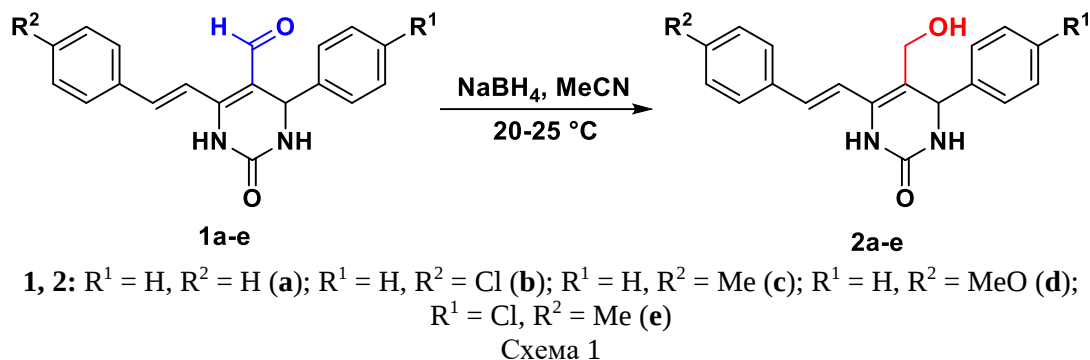
Урядова А.М., Макарова Е.С., Филимонов С.И.

Ярославский государственный технический университет, Ярославль, Россия.

e-mail: n-uryadova@mail.ru

Спирты и их производные занимают важное место в органическом синтезе, восстановление карбонильных групп является одним из значимых способов их получения, широко применяемым как в тонком химическом производстве, так и в лабораторной практике. 6-Стирилдигидропиримидиноны не получили широкого распространения в качестве субстратов для дальнейших модификаций, и литературные данные свидетельствуют лишь об их ограниченном применении в синтезе замещенных пиридо[1,2-с]пиримидинов [1] и спирохроманов [2]. При этом диарилдигидропиримидиноны, содержащие гидроксиметильную группу в пятом положении цикла, демонстрируют ингибирующую активность в отношении эластазы, а также обладают кардиопротекторными свойствами [3]. Однако в настоящее время существует ограниченное количество литературных данных о получении дигидропиримидинов с гидроксиметильной группой.

С целью получения 4-арил-5-гидроксиметил-6-стирилдигидропиримидинов **2** проведено восстановление замещенных 5-формилстирилпиримидинов **1** боргидридом натрия (схема 1). Реакция протекала в ацетонитриле при 20-25 °С в течение 4-5 часов. Строение полученных спиртов **2a-e** установлено с помощью ЯМР-спектроскопии. Кроме того, точное расположение функциональных групп подтверждено данными NOESY-спектроскопии на основании кросс-пиков протонов гидроксиметильной группы с протонами фенильного заместителя и протоном при двойной связи [4].



Литература

1. W. S. Shehab, M. G. Assy, H. Y. Moustafa, M. H. Abdellatif, H. M. Rahman *J. Iran. Chem. Soc.*, 2019, **16**, 2451.
2. A. S. Karandeeva, A. M. Uryadova, E. S. Makarova, M. V. Kabanova, S. I. Filimonov, Z. V. Chirkova, K. Y. Suponitsky, *Mendeleev Commun.*, 2023, **33**, 779.
3. WO Pat. 2005082864 A1; 2005.
4. А. М. Урядова, Е. С. Макарова, С. И. Филимонов, Ж. В. Чиркова, К. Ю. Супоницкий, *Изв. АН. Сер. хим.*, 2025, **74**, 1421.

- Sun Y., 216
 Абаев В.Т., 10
 Абиева Ф.А., 54
 Авакян Н.А., 55
 Аверин А.Д., 11
 Аверина Е.Б., 12
 Акимова Е.С., 56
 Аксенов А.В., 13
 Аксенов Н.А., 14
 Аксенова И.В., 168
 Андреева В.В., 218
 Арутюнов Н.А., 58
 Аскерова З.Г., 219
 Ахмадиев Н.С., 59
 Багрянская Е.Г., 15
 Байков С.В., 60
 Байкова С.О., 169
 Бакулев В.А., 16
 Балабанова С.П., 61
 Балова И.А., 17
 Барковский С.В., 62
 Барская Е.С., 63
 Белоглазкин А.А., 64
 Белоглазкина Д.В., 65
 Белоглазкина Е.К., 18
 Березняк Я.С., 66
 Бермешев М.В., 19
 Бесчастнова Т.Н., 170
 Борисевич С.С., 20
 Борисов Д.Д., 67
 Борисова Ю.Г., 220
 Борщев О.В., 68
 Бутов Г.М., 21
 Буторин И.И., 171
 Важенин Б.В., 221
 Васькина Н.Ф., 172
 Верещагина Я.А., 69, 173
 Войнов В.А., 70
 Волкова Н.С., 234
 Волчо К.П., 22
 Воробьев С.В., 71
 Воронина Ю.К., 72
 Воскресенский Л.Г., 23
 Габитова Э.Р., 73
 Гавришова Т.Н., 222, 223
 Газизов А.С., 24
 Галашев Р.Н., 174
 Галимуллина В.Р., 175
 Глебов Е.М., 74
 Говди А.И., 75
 Грин М.А., 25
 Гринёв В.С., 176
 Гришин И.Ю., 76
 Гришина Н.Ю., 77
 Гудкова И.О., 78
 Гусев Д.И., 79
 Гусейнов Ф.И., 224
 Гутнов А.В., 26
 Дарьин Д.В., 27
 Дегтярев Д.Д., 80
 Дельцов И.Д., 81
 Демидов О.П., 177
 Денисов М.С., 82
 Диденко Е.А., 178
 Доценко В.В., 28, 179
 Дяченко В.Д., 29
 Дяченко И.В., 83
 Егоров Д.И., 84
 Егорян А.А., 225
 Ермоленко А.П., 85
 Ефремов А.Н., 180
 Жукова Н.А., 86
 Зазерин К.С., 87
 Залалтдинова А.В., 226
 Зацепилина А.М., 181
 Заякин И.А., 88
 Зонов Р.В., 89
 Зыкова Д.А., 227
 Зырянов Г.В., 30
 Зырянова Е.Ю., 90
 Иванова О.А., 31
 Измestьев А.Н., 91
 Иконникова В.А., 92
 Илькин В.Г., 93
 Ильков К.В., 182
 Илькова А.А., 184
 Исаева Ю.А., 185
 Исаков С.С., 94
 Исомиддинов Ж.К., 95
 Карандеева А.С., 228
 Каретников Г.Л., 186
 Климочкин Ю.Н., 32
 Князева Е.А., 96
 Коблов И.А., 229
 Кожихов А.А., 187
 Колодина А.А., 97
 Коршин Д.Э., 188
 Котовщиков Ю.Н., 98
 Красновская О.О., 99
 Краснокутская Е.А., 33
 Кряж В.В., 100
 Кузнецова Е.А., 101
 Кузьминов И.К., 230
 Кукушкин М.Е., 102
 Курликов А.Э., 103
 Лавринченко Ю.А., 231
 Ларин А.А., 104
 Ларин А.Н., 105
 Ларионов В.А., 106
 Латыпова Л.З., 107, 189
 Ликликадзе Г.К., 108

- Лисник Г.Э., 109
 Лупоносов Ю.Н., 110
 Магкоев Т.Т., 111
 Макаренко С.В., 34
 Малышева А.С., 232
 Малюга В.В., 112
 Мамедов В.А., 35
 Мамедова В.Л., 191
 Мамедова С.В., 113
 Маркин Г.В., 233
 Мачулкин А.Э., 114
 Медведева С.М., 115, 192
 Менчиков В.В., 116
 Метальникова Н.М., 117
 Миколайчук О.В., 118
 Мингажетдинова Д.О., 119
 Миронов В.Ф., 7
 Михайлов О.А., 193
 Мороз А.А., 120
 Муминов Р.Ш., 194
 Мустакимова Л.В., 235
 Мячина К.А., 121
 Нелюбина А.А., 195
 Немытов А.И., 196
 Непочатый Г.Д., 122
 Нефедова А.А., 123
 Никитин И.А., 124
 Никифоров Е.А., 197
 Николаева Д.В., 198
 Новиков М.С., 36
 Осипов Д.В., 125, 199
 Осянин В.А., 126, 200
 Офицерова Е.С., 236
 Панькова А.С., 37
 Перевалова Д.С., 127
 Петров Л.В., 237
 Петрова Ю.В., 128
 Пилипенко И.А., 190
 Платонов В.А., 238
 Полетавкина Л.А., 129
 Поляков В.С., 201
 Пономаренко С.А., 8
 Портнов С.В., 130
 Потапова А.П., 131
 Потапова С.С., 132
 Пугачев М.В., 202, 203
 Раббаниева Э.С., 133, 204
 Радюш Е.А., 134
 Розенцвейг И.Б., 38
 Ростовский Н.В., 39
 Рычихина Е.Д., 205
 Сабитов Э.Р., 206
 Садчикова Е.В., 40
 Сайгитбаталова Е.Ш., 135
 Сайфутдинова Ю.М., 207
 Сапожников С.В., 136
 Середа В.А., 137
 Сидлярук Н.А., 138
 Скляр А.Е., 139
 Скрыльникова М.А., 140, 208
 Смолобочкин А.В., 141
 Соколов А.Е., 142
 Соколова А.Д., 143
 Солдатова Н.С., 144
 Сосновских В.Я., 41
 Спектор Д.В., 145
 Старновская Е.С., 146
 Степанов Р.С., 209
 Столповская Н.В., 147, 210
 Сухоруков А.Ю., 42
 Терентьев А.О., 6
 Титов Г.Д., 148
 Трахинина С.Ю., 149
 Тресцова М.А., 150
 Третьяков Е.В., 43
 Урядова А.М., 239
 Усова С.Д., 151
 Утепова И.А., 44
 Фазлыева А.М., 152
 Федоров Ю.В., 45
 Федорова О.А., 46
 Ферштат Л.Л., 47
 Филимонов В.Д., 153
 Филиппов И.П., 154
 Филькина М.Е., 155
 Финагеева М.О., 156
 Хабибрахманова А.М., 157, 211
 Хазипов О.В., 158, 212
 Хазипова О.В., 213
 Хлебников А.Ф., 48
 Цховребов А.Г., 49
 Черенева В.Д., 159
 Чечулина А.С., 160
 Чугунова Е.А., 50
 Чупахин Е.Г., 161
 Чусов Д.А., 51
 Шамбалова В.Э., 214
 Шаферов А.В., 162
 Шевченко М.А., 163
 Шетнев А.А., 164
 Шибаева К.О., 165
 Шонин Г.А., 215
 Шуваев А.Д., 166
 Юсубов М.С., 52

