

Список литературы

1. Ibrahim S. M., Baraka M. M., El-Sabbagh O. I., Kothayer H. // *Med. Chem. Research*, 2013. – 22. – P. 1488–1496.
2. Castellano S., Stefancich G., La Colla P., Musiu C. J. // *Heterocyclic Chem.*, 2000. – 37. – P. 1539.
3. Effland R. C., Klein J. T., Richard R. // *U.S. Patent 4517195*, 1985.

ПРИМЕНЕНИЕ SuFEx РЕАКЦИИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОКСАЗОЛА

Н. В. Даниленко, М. О. Луцук

Научный руководитель – д.х.н., профессор А. И. Хлебников

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, проспект Ленина, 30, nadezhda.dani@gmail.com

Бензоксазол – один из важнейших гетероциклических каркасов, обнаруженный во многих биологически активных соединениях. Производные бензоксазола обладают различной биологической активностью, в том числе противомикробным, противоопухолевым, противовирусным, антигистаминным, антиоксидантным, противовоспалительным, противосудорожным, антигельминтным, антидепрессивным и обезболивающим действием [1]. Кроме того, бензоксазолы обладают флуоресцентными свойствами и могут быть использованы в качестве флуоресцентных меток или материалов для сенсорных технологий [2].

Несмотря на достаточно широкий ряд известных производных бензоксазола, о влиянии группы –SO₂F на биологическую активность известно недостаточно. Получить такие производные можно при помощи реакции сера(VI)-фторидного обмена (Sulfur (VI) fluoride exchange – SuFEx). SuFEx реакции относят к новому типу клик реакций. Понятие клик-химии было предложено в качестве концептуальной основы для селективной функционализации и молекулярной сборки. В частности, с помощью клик-реакций можно формировать синтетически важные связи углерод-гетероатом [3].

С помощью SuFEx реакции нами было получены производные 2-фенилбензоксазола (Схема 1). Процесс проводили в двухкамерном реакторе, где в камере А при взаимодействии 1,1'-сульфонилдиимидазола (SDI) с KF и муравьиной кислотой образовывался газообразный SO₂F₂, а в камере Б протекала клик-реакция.

В ходе проведения синтеза мы столкнулись с проблемой образования больших количеств побочного продукта – бис(2-(бензоксазол-2-ил)фенил)сульфата (рисунок 1) за счет дальнейшего взаимодействия целевого продукта 2-(2-фенилфторсульфат)бензоксазола с исходным 2-(2-гидроксифенил)бензоксазолом. В связи с этим нами было исследовано влияние увеличения избытка газообразного SO₂F₂ на выход основного и побочного продуктов реакции.

Таким образом, при увеличении избытка SO₂F₂ в 1,5 раза выход целевого продукта увеличивается практически в 2 раза.

Было обнаружено, что полученные производные бензоксазола способны к люминесценции, в связи с чем было принято решение о дальнейшем изучении их люминесцентных свойств.

Расчет характеристик люминесценции проводился для фторсульфатных производных 2-фенилбензоксазола с применением метода функционала плотности (DFT) в программе Gaussian 16.

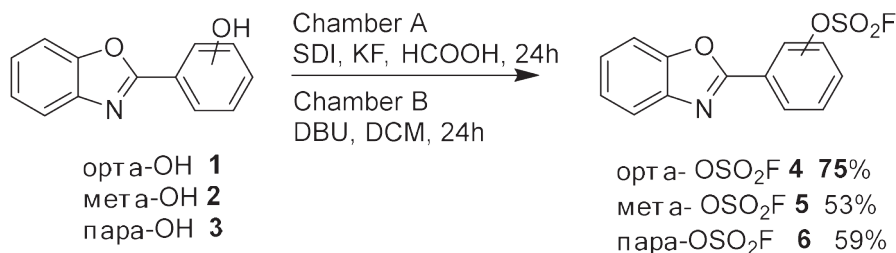


Схема 1.

Рассматривая диапазон видимого излучения на рассчитанных спектральных контурах, для орто-, мета- и пара-замещенных производных можно увидеть максимумы флуоресценции при 416, 408 и 412 нм соответственно. Это отвечает синему или сине-зеленому цвету излучения, что совпадает с визуально наблюдаемыми цветами.

Наличие выраженной способности к флуоресценции делает исследуемые соединения перспективными для создания на их основе люминесцентных сенсоров для техники и медицины.

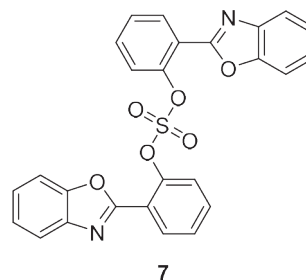


Рис. 1. бис(2-(бензоксазол-2-ил)фенил)сульфат

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-23-00460).

Список литературы

1. Singh S.; Veeraswamy G.; Bhattarai D.; Goo J.-I.; Lee K.; Choi Y. // *Asian J. Org. Chem.*, 2015. – 4. – P. 1338–1361.
2. Jin X.; Ma X.; Zhong W.; Cao Y.; Zhao H.; Leng X.; Yang J.; Zhou H.; She M. // *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.*, 2021. – 249. – 119217.
3. Dong J.; Krasnova L.; Finn M. G.; Sharpless K. B. // *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2014. – 53. – P. 9430–9448.

НОВОЕ СЕМЕЙСТВО ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОЛИАЗОТНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ 1,2,4-ТРИАЗОЛА

Д. Д. Дегтярев

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

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Химический факультет

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН

119991, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, holydanke@gmail.com

В последние несколько лет доминирующим трендом в создании энергоемких веществ является построение структур, основанных на модификации 3,5-дизамещенных 1,2,4-триазолов и [1,2,4]-триазоло-[1,2,4]-триазиновых бициклических структур (ТТХ, DNT, NTO). Такой подход позволяет достичь в первую очередь высоких параметров термической стабильности, что в сочетании с низкой чувствительностью и повышенным энергетическим профилем создает конкуренцию активно применяющимся аналогам (RDX, HMX, TATB). В рамках создания сбалансированных энергоемких структур нами

проводится исследование нового семейства энергоемких веществ на основе 1,2,4-триазолов, содержащих нитрофуроксанильный фрагмент. Включение 3-нитрофуроксана в общую структуру позволяет сбалансировать общий энергетический профиль без потери чувствительности и кристаллической плотности молекул. Вторым направлением нашего исследования стало создание бициклических триазоло-триазиновых структур, которые сочетают в себе высокие характеристики плотности и термостабильности, достигающиеся за счет π-π и нитро-π взаимо-

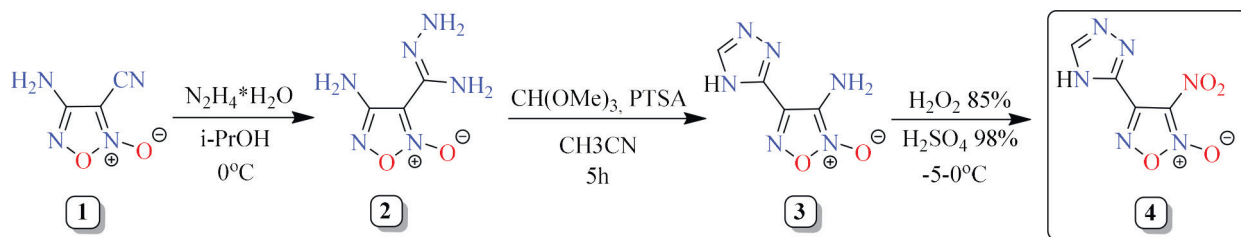


Рис. 1.