

Рис. 2. Расчетный спектр пигмента голубого фталоцианинового для четырехмолекулярных кластеров с использованием разных методов оптимизации геометрии

Также был получен спектр для четырехмолекулярных кластеров пигмента голубого фталоцианинового, который имеет более жесткую структуру и не так чувствителен к методу оптимизации геометрии. На рис. 2 приведен спектр, рассчитанный на уровне теории PBE0/def2-SVPD для разных методов оптимизации, вид-

но, что положение основных полос поглощения примерно совпадает.

Полученный алгоритм позволяет за разумное время определять спектральные характеристики органических пигментов с приемлемой погрешностью.

Список литературы

1. Siewertsen R., Neumann H., Buchheim-Stehn B. [et al.] // *Journal of the American Chemical Society*. – 2009. – Vol. 131. – № 43. – P. 15594–15595. – DOI: 10.1021/ja906547d.
2. Дегтярев А.А., Ростова Д.П., Дьячкова Т.П., Тришина А.В. // *Журнал физической химии*. – 2023. – Т. 97. – № 10. – С. 1447–1456. – DOI: 10.31857/S0044453723100059.
3. De Souza B., Neese F., Izsák R. // *J. Chem. Phys.* – 2018. – Vol. 148. – № 3. – P. 034104. – DOI: 10.1063/1.5010895.

СИНТЕЗ НОВЫХ АЗИНОВ НА ОСНОВЕ ИНДЕНОХИНОКСАЛИНА И ТРИПТАНТРИНА

Е. И. Самородова

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30
betani47@gmail.com

Большинство лекарственных препаратов имеют гетероциклические фрагменты, которые содержат в своем строении несколько различных гетероатомов N, O, S, P, Hal. Проявляя различные виды биологической активности, такие органические молекулы могут быть модифицированы для усиления определенных биологических свойств. Благодаря нахождению в структуре различных гетероатомов, такие соединения имеют довольно высокую реакционную способность. Кроме того, некоторые заместители могут приводить к повышению растворимости.

Производные 11H-индено[1,2-b]хиноксалин-11-она являются эффективными ингибиторами ферментов семейства C-Jun N-терминальных киназ [1]. Синтез и исследование

производных индоло[2,1-b]хиназолин-6,12-диона (триптантрина) обладают выраженными противовоспалительными свойствами, являются специфическими ингибиторами киназ JNK1-3 и циклооксигеназы-2. Они ингибируют биосинтез простагландинов и лейкотриенов, подавляют активность NO-синтазы [2].

Целью исследования являлась разработка методов синтеза новых азинов 11H-индено[1,2-b]хиноксалин-11-она и индоло[2,1-b]хиназолин-6,12-диона (триптантрина) на основе их гидразонов с производными бензальдегидов, в структуре которых имеются различные заместители. Один из первых азинов был нами получен и описан в работе [3].

Таким образом, при выполнении исследования нами был получен ряд азинов на основе 11*H*-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она (Схема 1) и индоло[2,1-*b*]хиназолин-6,12-диона (триптан-

трина) (Схема 2). Была оптимизирована методика синтеза гидразонов двух гетероциклов и синтезированы соответствующие азины.

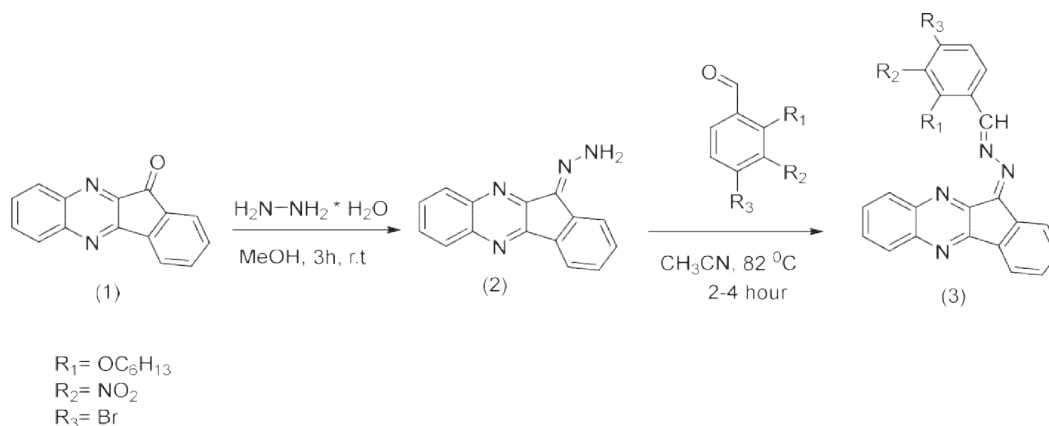


Схема 1. Схема синтеза гидразона инденохиноксалина и соответствующих азинов

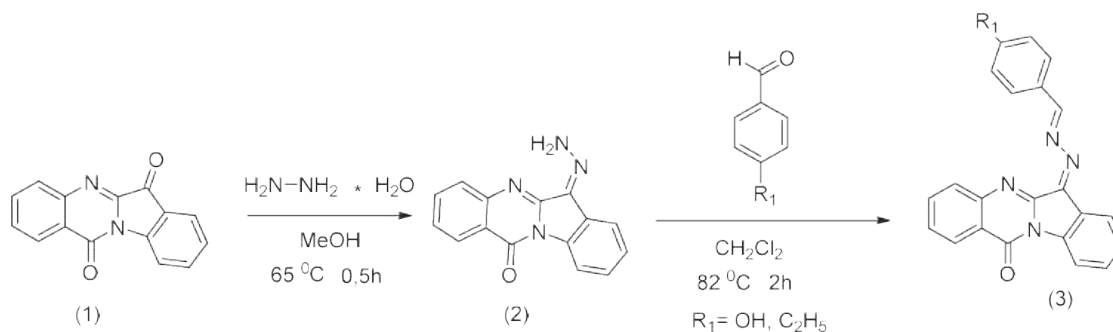


Схема 2. Схема синтеза гидразона триптантрина и соответствующих азинов

Список литературы

1. Schepetkin Igor A., Khlebnikov Andrei I., Potapov Andrei S., Kovrizhina Anastasia R., Matveevskaya Vladislava V., Belyanin Maxim L., Atochin Dmitriy N., Zanoza Svitlana O., Gaidarzhy Nadiya M., Lyakhov Sergiy A., Kirpotina Liliya N., Quinn Mark T. // *European Journal Medicinal Chemistry*. – 2019. – P. 187.
2. Schepetkin Igor A., Kovrizhina Anastasia R., Stankevich Ksenia S., Khlebnikov Andrei I., Kirpotina Liliya N., Quinn Mark T., Cook Matthew J. // *Frontiers in Pharmacology*. – 2022. – September 12. 13:958687.
3. Kovrizhina A.R., Samorodova E.I., Khlebnikov A.I. // *Molbank*. – 2021. – 2021. – M1299.