

Схема 2.

Выводы:

1. Выполнены квантово-химические расчеты высокого уровня методом DFT для ряда N-алкенильных производных карбазола, фенотиазона и феноксазина в вакууме.
2. Получены характеристики электронного и пространственного строения молекул, которые могут быть использованы для построения коли-

чественных моделей «структура – реакционная способность».

3. Установлено, что в молекулах цис-изомеров и α -замещенных производных имеют место значительные стерические взаимодействия между гетероциклом и олефиновым фрагментом, приводящие к нарушению p,p-сопряжения.

Список литературы

1. Анфиногенов В.А., Охтеменко И.Н., Хлебников А.И., Филимонов В.Д. // *Ж. орган. химии*, 1997. – Т.33. – №7. – С.10597–1102.
2. Анфиногенов В.А., Хлебников А.И., Филимонов В.Д., Огородников В.Д. // *Ж. орган. химии*, 1999. – Т.35. – №3. – С.481–488.
3. Foresman James V. *Exploring Chemistry with electronic structure methods*. Gaussian, Inc., 1996. – 302p.
4. Серба П.В., Мирошниченко С.П., Блинов Ю.Ф. *Квантово-химические расчеты в программе GAUSSIAN по курсу «Физика низкоразмерных структур»*. – Таганрог: ТТИ ЮФУ, 2012. – 100с.

СИНТЕЗ МУЛЬТИТОПНЫХ ЛИГАНДОВ – ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4-ТРИАЗОЛ-1-ИЛМЕТИЛАМИНА

М.А. Ключенко

Научный руководитель – д.х.н., профессор А.С. Потапов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, klyuchenkomaksim@mail.ru

Соединения, содержащие два и более триазольных кольца, соединенные алифатическим линкером, могут выступать в качестве хелатирующего лиганда в координационных соединениях различной структуры. Так как данные структуры могут образовывать хелатные комплексы с ионами большинства переходных металлов [1], их можно использовать в качестве сенсоров [2] и строительных блоков для металлорганических

каркасов [3], известные в литературе как MOFs [4]. Введение в алифатический линкер дополнительных донорных атомов, таких как азот, способствует увеличению хелатирующей способности лиганда.

Целью данной работы является получение новых хелатирующих лигандов на основе 1,2,4-триазола. В качестве линкера нами были применены производные диметиланилина (6–9).

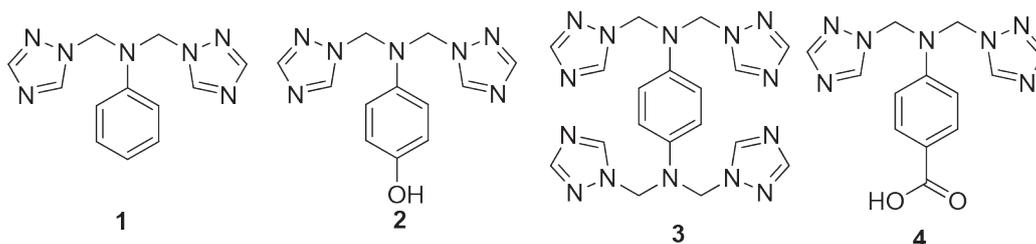


Рис. 1. Битопные лиганды производные бис((1H-триазол-1-ил)метил)анилина

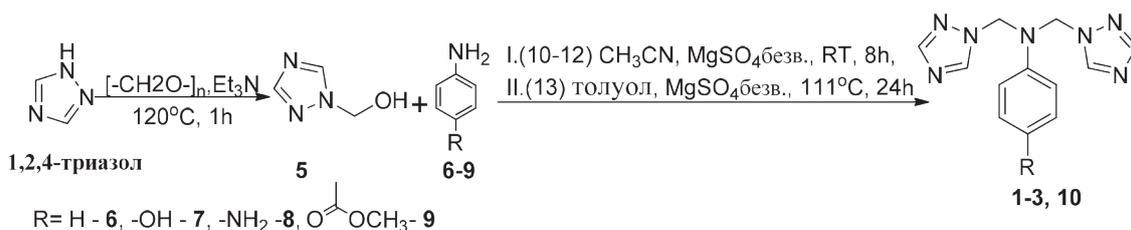


Рис. 2. Общая схема синтеза лигандов производных бис((1H-триазол-1-ил)метил)анилина

В качестве исходного блока применен 1H-гидроксиметил-1,2,4-триазол (5). Который получен реакцией сплавления 1,2,4-триазола и параформальдегида, с добавлением в качестве катализатора триэтиламина. Далее с полученным соединением (5) проводили реакцию конденсации с некоторыми производными анилина, такими как анилин (6), пара-аминофенол (7), пара-фенилендиамин (8) и пара-аминобензойная кислота, в которой предварительно защитили карбоксильную группу (9) (Рис. 2). В этих реакциях в качестве осушающего агента применили безводный сульфат магния. В качестве растворителя для субстратов (6–8) применили безводный ацетонитрил, а для субстрата (9) толуол. Данную реакцию проводят при нагревании, так как наличие акцепторной карбоксильной группы замедляет реакцию конденсации.

В случае соединения (10), метильную защи-

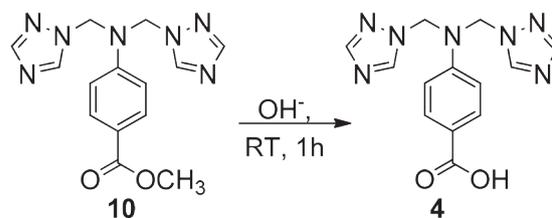


Рис. 3. Схема снятия метильной защиты

ту карбоксильной группы снимали методом щелочного гидролиза (Рис. 3). Затем, к полученной натриевой соли соединения (4), добавили небольшое количество воды и катионообменную смолу, до нейтральной реакции, после чего отфильтровывали смолу и испаряли воду.

Таким образом, в этой работе были получены новые битопные лиганды (1–4) (Рис. 1). Данные структуры были доказаны методами ЯМР ¹H, ¹³C и ИК-спектроскопии.

Список литературы

1. Pettinari C., Pettinari R. *Coord. Chem. Rev.*, 2005.– 249.– 663–691.
2. Kreno L.E., Leong K., Farha O.K., Allendorf M., Van Duyne R.P., Hupp J.T. *Chem. Rev.*, 2012.– №112.– P.1105–25.
3. Potapov A.S., Nudnova E.A., Khlebnikov A.I., Ogorodnikov V.D., Petrenko T.V., *Inorg. Chem. Commun.*, 2015.– №53.– 72–75.
4. Rowsell J.L.C., Yaghi O.M. *Microporous Mesoporous Mater.*, 2004.– P.73.– 3.

СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 11Н-ИНДЕНО[1,2-В]-ХИНОКСАЛИНА КАК ПЕРСПЕКТИВНЫХ ИНГИБИТОРОВ JNK (C-Jun N-ТЕРМИНАЛЬНОЙ КИНАЗЫ)

А.Р. Коврижина

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

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

Было показано [1], что оксим 11H-индено[1,2-b]хиноксалин-11-она (IQ-1, схема 1) и его натриевая соль (IQ-1S, схема 1) являются эффективными и специфическими ингибиторами семейства ферментов C-Jun N-терминальных киназ (JNK) и могут рассматриваться как базовые соединения для разработки противовоспа-

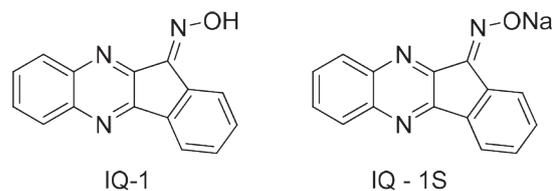


Схема 1.