

выбрана механохимическая активация реакции (в отсутствие растворителя).

В ходе нашей работы было установлено, что бетулин **1** под действием йодирующей системы $\text{PhI}(\text{OAc})_2/\text{I}_2$ при мольных соотношениях компонентов 1:1:1 в условиях механохимической активации реакции в течение 15 минут превращается в 30-йодобетулин **2** с выходом 52 %. В сравнении с этим результатом, аналогичная реакция в классических условиях (в среде хлороформа и нагревании в течение 1 ч) также завершается образованием продукта аллильного йодирования **2**, но с меньшим 37 % выходом.

Структура полученного вещества **2** доказана с привлечением данных физико-химических методов анализа: определения $T_{\text{пл}}$, ЯМР ^1H и ^{13}C ,

ИК-спектроскопии. Физико-химические свойства полученного продукта **2** согласуются с литературными данными [2].

Таким образом, нами впервые предложен неклассический способ йодирования бетулина – в условиях механохимической активации реакции в отсутствие растворителя. Кроме того, мы впервые применили йодирующую систему $\text{PhI}(\text{OAc})_2/\text{I}_2$ для получения 30-йодобетулина из бетулина. Успешный результат наших исследований имеет значимый фундаментально-прикладной характер как в области химии тритерпеноидов и поливалентного йода, так и в сфере использования экологически малоопасных «сухих» методов в органическом синтезе.

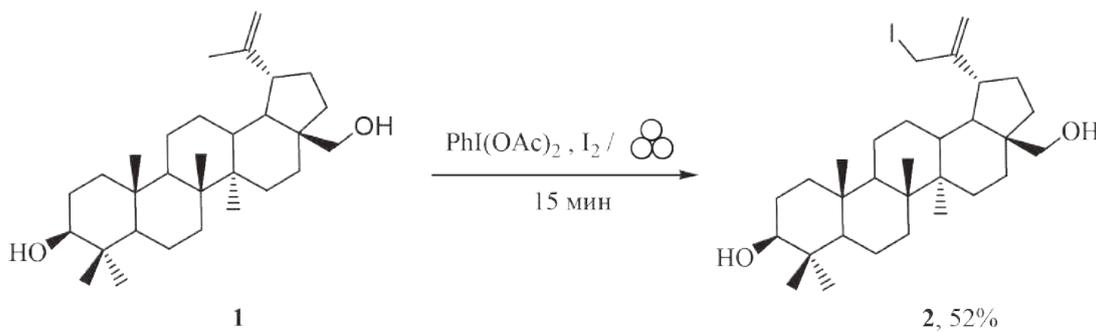


Схема 1. Механохимический способ йодирования бетулина

Список литературы

1. Amiri S., Dastghaib S., Ahmadi M., et al. // *Biotechnol. Adv.* – 2020. – Vol. 38. – P. 1–39.
2. Yemets S.V., Shubina T.E., Krasutsky P.A. // *Org. Biomol. Chem.* – 2013. – Vol. 11. – P. 2891–2897.
3. Узенкова Н.В., Петренко Н.И., Шакиров М.М., Шульц Э.Э., Толстиков Г.А. // *ХПС.* – 2005. – Т. 41. – № 6. – С. 571–577.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И БИОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРОИЗВОДНЫХ ИНДЕНОХИНОКСАЛИНА И ТРИПТАНТРИНА

А. В. Уваров, Е. В. Плотников

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30

avu12@tpu.ru

Гетероциклические соединения синтетического и природного происхождения, такие как 11*H*-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-он (**1**) и индоло[1,2-*b*]хиназолин-6,12-дион (**2**), являются

удобным каркасом для синтеза лекарственных препаратов [1].

Алкилированные соединения (**3** и **4**) содержащие карбонильные группы, синтезированные ранее [2], а также оксим-производные

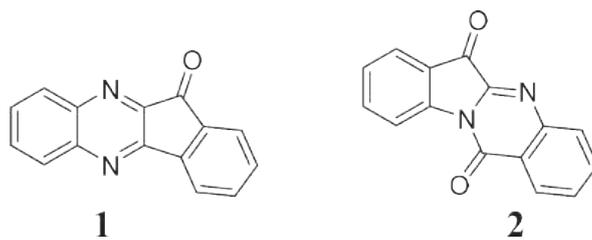


Схема 1

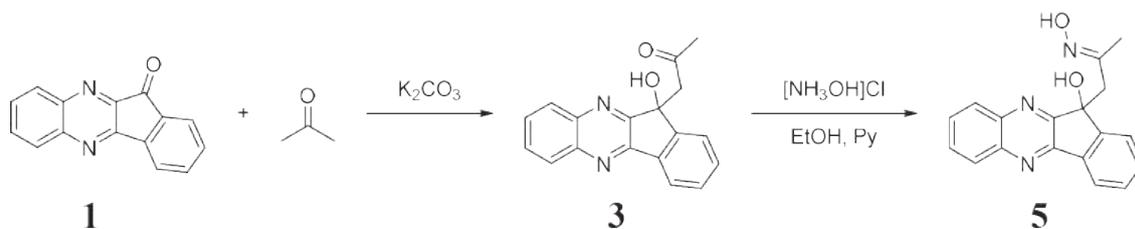


Схема 2

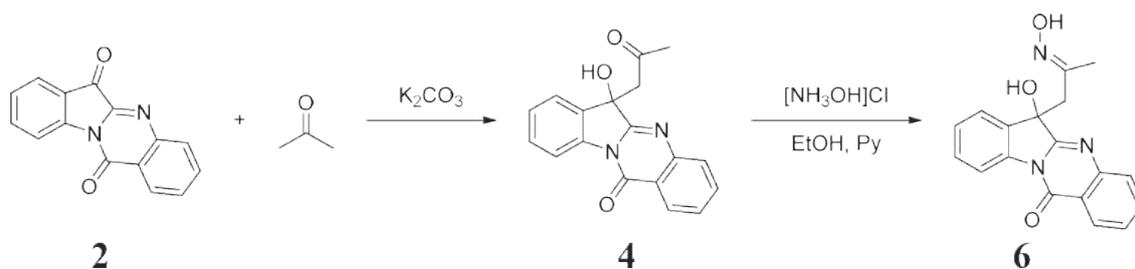


Схема 3

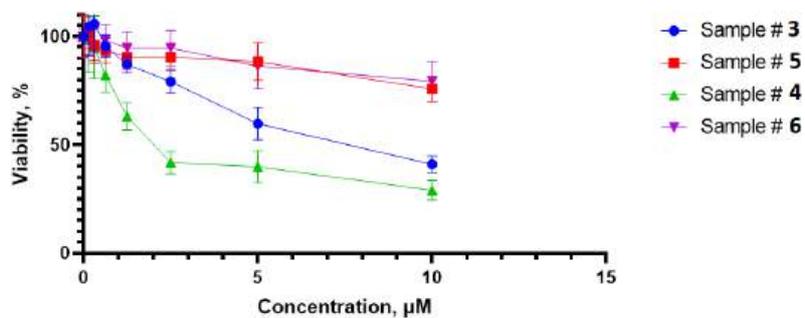


Рис. 1. Жизнеспособность линии клеток рака яичников

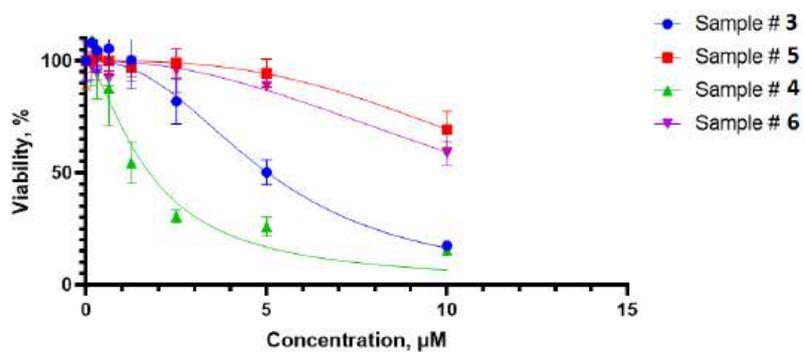


Рис. 2. Жизнеспособность линии клеток рака кожи

этих веществ (**5** и **6**), полученные нами впервые, показаны на схемах 1 и 2 соответственно. Представленные соединения вызывают интерес как перспективные биологически активные субстраты.

Был проведен МТТ-тест для соединений **3–6** на жизнеспособность линий клеток рака яичников и рака кожи (Рисунки 1 и 2). Данные получены Е. В. Плотниковым.

Результаты МТТ-теста показали, что соединения **3** и **4** проявили наибольшую токсичность

к клеткам рака яичников и кожи, что позволяет считать их перспективными для разработки лекарственных препаратов.

Также с помощью программы GAUSSIAN 09w в приближении B3LYP/6-31+G(d) проведены квантово-химические расчеты для поиска наиболее вероятной конформации соединений **5** и **6**, которые позволяют предположить, что термодинамически более устойчивыми являются трансoidные конфигурации гидроксильных групп оксимов.

Список литературы

1. Ruhemann S. *Cyclic di- and tri-ketones* // *J. Chem. Soc. Trans.* – 1910. – Vol. 97. – P. 1438–1449.
2. Bergman J. *The structure of some indolic constituents in Couroupita Guianensis Aubl.* / *JO, L.* // *Tetrahedron Lett.* – 1977. – P. 2625.

СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ ФУРАНОЭРЕМОФИЛАН-14 β ,6 α -ОЛИДА И ЕЕ РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ

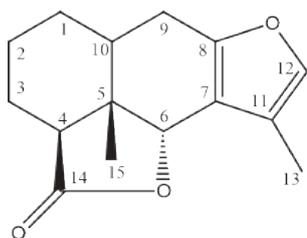
В. Л. Угай¹, Л. К. Абуляисова¹, Е. А. Краснокутская², С. М. Адекенов³

¹НАО «Карагандинский Университет им. академика Е. А. Букетова»
100026, Казахстан, г. Караганда

²Национальный исследовательский Томский политехнический Университет
634050, Россия, г. Томск

³АО «Научно-производственный Центр «Фитохимия»
100009, Казахстан, г. Караганда

Бузульник крупнолистный (*Ligularia macrophylla* (Lebeb.) DC) является перспективным источником биологически активных терпеноидных соединений, среди которых основным компонентом является фураноэремофилян-14 β ,6 α -олид (**1**), состава C₁₅H₁₈O₃ с т. пл. 135,7–137,1 °С (петролейный эфир:этилацетат), [α]_D – 45° (с 0,45, диоксан), содержащийся как в надземной, так и подземной части растения [1]. Образец фураноэремофилян-14 β ,6 α -олида обладает противовоспалительной активностью.



(1)

Схема 1

Фураноэремофилян-14 β ,6 α -олид – сескви-терпеновый γ -лактон кадинановой структуры, особенностью ее является наличие γ -лактонного кольца и фуранового цикла, рассматриваемых как реакционные центры данного полифункционального соединения.

Квантово-химические расчеты структуры молекулы фураноэремофилян-14 β ,6 α -олида выполнены методом теории функционала плотности (DFT) в рамках программы Gaussian [2]. Модель молекулы построена с помощью программы GaussView [3].

Более высокая электроотрицательность кислородного атома и обогащенные электронами двойные связи фуранового кольца приводит к появлению положительных зарядов на атомах C7, C8, C11, C12, и создает благоприятные условия для электрофильной атаки.

К реакциям окисления соединений с двойными связями, в которых сохраняется углеродный скелет, относятся реакции эпоксицирования, в частности надкислоты электрофильно присоединяются к непредельной связи. Эпоксицированию должна подвергаться наиболее замещенная