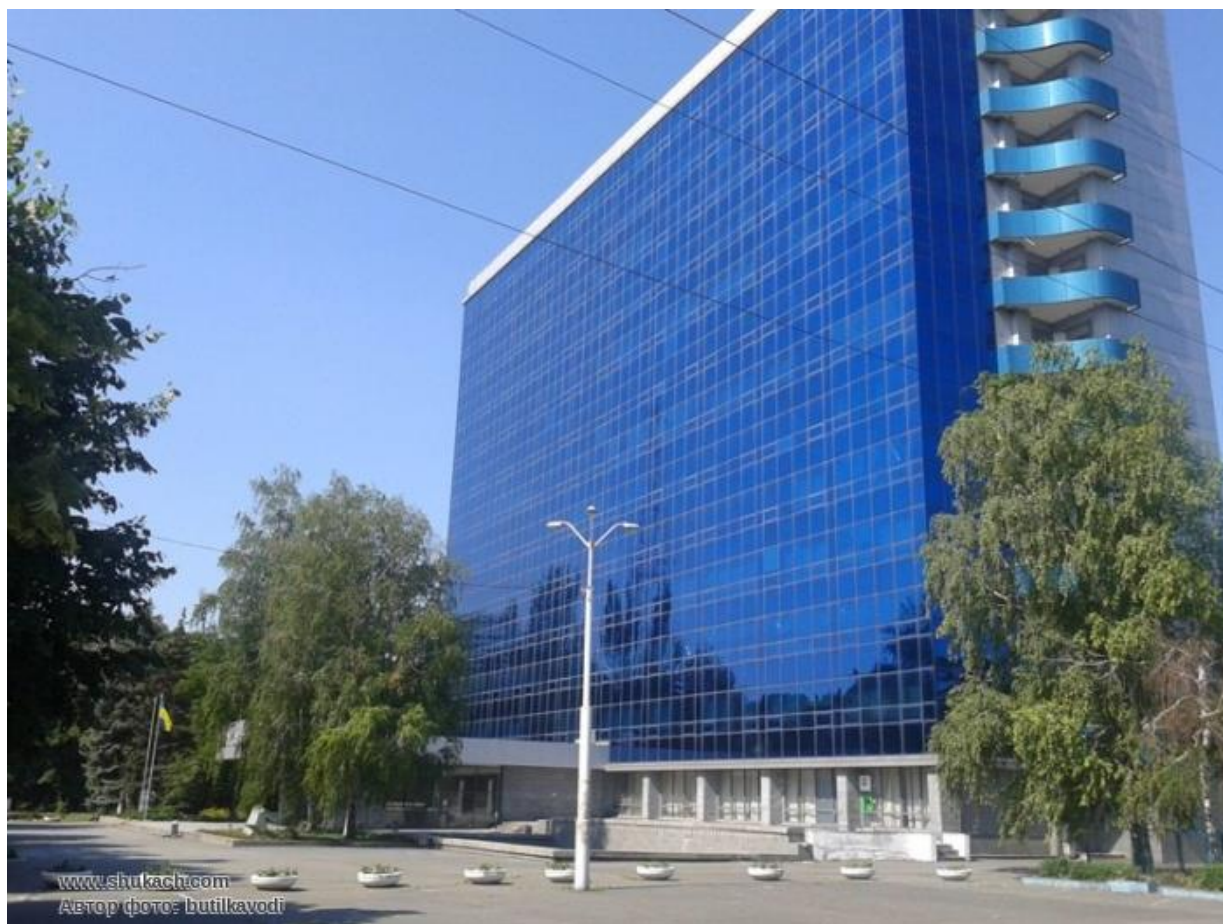


XX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 16-19 травня 2022 р.

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**Інститут органічної хімії
НАН України**

XX ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ ТА СТУДЕНТІВ
з актуальних питань сучасної хімії



МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Дніпро
16-19 травня 2022 р.

XX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 16-19 травня 2022 р.

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**Інститут органічної хімії
НАН України**

XX ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ ТА СТУДЕНТІВ
з актуальних питань сучасної хімії



Дніпро
16-19 травня 2022 р.

XX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 16-19 травня 2022 р.

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

ISBN

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
Інститут органічної хімії НАН України

Голова оргкомітету

Варгалюк Віктор Федорович, декан хімічного факультету ДНУ, д-р хім. наук, професор, заслужений діяч науки і техніки України

Т67 «XIX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії» Дніпро, 2022. - 71 с.

ISBN

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

ГАЛОГЕНГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЯ ТЕРМІНАЛЬНИХ ТА ІНТЕРНАЛЬНИХ 2-АЛІЛТІО-3-МЕТИЛ(ФЕНІЛ)-7-ТРИФТОРОМЕТИЛХІНАЗОЛІН-4-ОНІВ

Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю., Лендел В.Г.

Державний вищий навчальний заклад

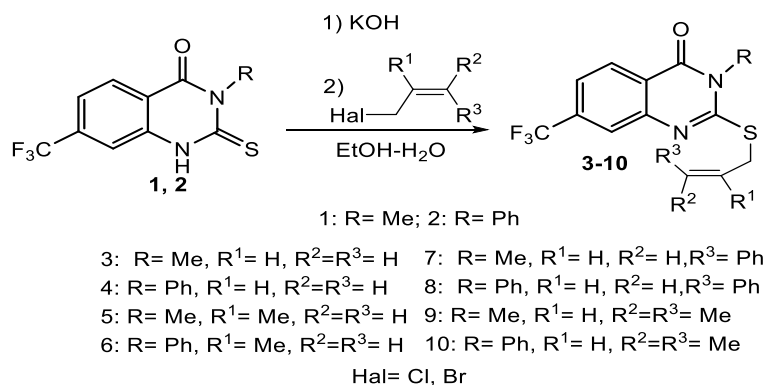
«Ужгородський національний університет»

dianabereksazi@gmail.com

Серед великої кількості нітрогеновмісних гетероциклічних сполук одними з найбільш важливих у біологічному відношенні є моноциклічні та конденсовані азини, похідні яких є природними сполуками та приймають участь у багатьох біологічних процесах. Особливе місце серед них займають конденсовані похідні хіназоліну, які є синтетичними аналогами природних речовин з високою біологічною активністю, що робить їх потенційними об'єктами для пошуку нових біоактивних сполук в даному ряду. Одним із найефективніших та зручних методів одержання азола(азино)хіназолінів є електрофільна внутрішньомолекулярна циклізація N(S)-ненасичених похідних хіназолінів з використанням різних галогеновмісних електрофільних агентів. Аелювання п'яти або шестичленного циклу в процесі реакції електрофільної гетероциклізації залежить від таких факторів як природа галогену, полярність розчинника, умови проведення реакції та структурних особливостей субстрату чи реагенту. Метою даної роботи являється синтез біологічно перспективних конденсованих хіназолінів та дослідження регіохімії процесу електрофільної циклізації термінальних та інтернальних алільних тіоестерів трифторометилзаміщеного хіназолін-4-ону під дією галогенів (бром, йод).

Як об'єкти дослідження галоциклізації використано термінальні та інтернальні 2-алілтїо-3-метил(феніл)-7-трифторометилхіназолін-4-они **3-10**, які отримано із синтетично доступних 3-метил(феніл)-2-тіоксо-7-(трифлуорометил)-2,3-дигідрохіназолін-4(1H)-онів **1, 2** дією алкенілгалогенідів в спиртово-лужному середовищі (Схема 1).

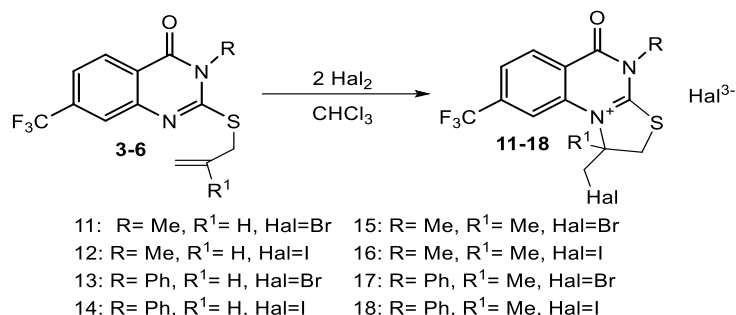
Схема 1



Реакцію галогенування тіоестерів **3, 4** проводили в середовищі хлороформу при постійному перемішуванні реагентів (бром — 8 годин, йод — 24 години) та кімнатній температурі. Встановлено, що галогеногетероциклізація 2-алілтїохіназолін-4-онів **3, 4** відбувається регіоселективно з аелюванням тіазолінового циклу (схема 2). У результаті реакції виділено та ідентифіковано тригалогеніди 1-(галогенометил)-4-метил-5-оксо-8-(трифлуорометил)-1,2,4,5-тетрагідротіазоло[3,2-а]хіназолін-10-ію **11-14** ангулярної будови.

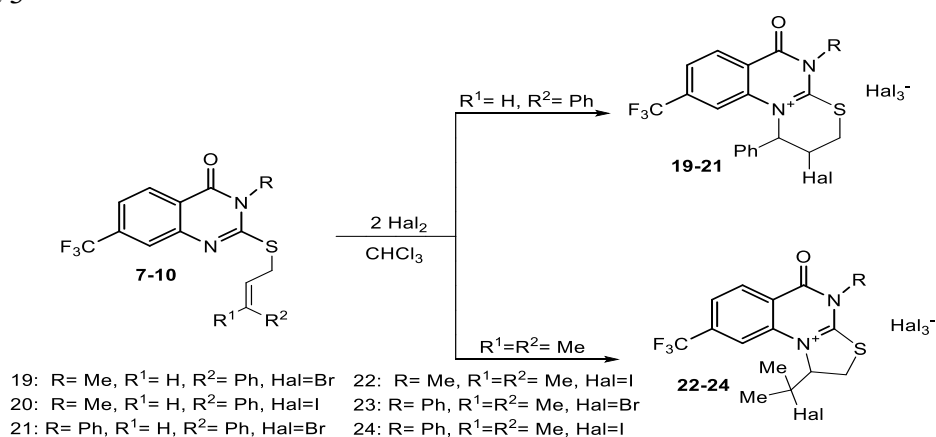
Знайдений напрямок реакції галогенування термінально незаміщених алільних тіоетерів був успішно реалізований також і на металільних тіоетерах 7-(трифлуорометил)хіназолін-4(3H)-ону **5**, **6**. Виявлено, що у вищезгаданих умовах металільні тіоетери регіоселективно анелюють тіазоліновий цикл з утворенням ангулярних тригалогенідних солей thiazolo[3,2-a]quinazoline **15-18** (Схема 2).

Схема 2



Наявність замісника біля термінального атома карбону алільного фрагменту може суттєво вплинути на напрямок галогеноциклізації. Для з'ясування впливу цього фактору на перебіг реакції електрофільної циклізації проведено галогенування цинамільних **7**, **8** та пренільних тіоетерів **9**, **10**. Встановлено, що при дії двократного надлишку галогенів в середовищі хлороформу на цинамільні тіоетери **7**, **8** відбувається анелювання тіазинового циклу з утворенням тіазинохіназолінів **19-21** ангулярної будови (Схема 3). З літератури відомо що галогеноциклізація пренільних тіоетерів чи етерів гетероциклів приводить до анелювання тіазольного або тіазинового циклів. Різна регіоселективність пояснюється впливом природи гетероциклу. Ми дослідили взаємодію пренільних тіоетерів 7-(трифлуорометил)хіназолін-4(3H)-ону **9**, **10** з бромом та йодом в аналогічних умовах, що і для термінально незаміщених алільних та цинамільних тіоетерів. Встановлено, що регіохімія процесу галогенування тіоетерів **9**, **10** відбувається аналогічно до алільних похідних з анелюванням тіазолінового кільця до остова хіназоліну з утворенням тригалогенонієвих солей **22-24** (Схема 3).

Схема 3



Таким чином, напрямок галогеноциклізації алільних тіоетерів 7-(трифлуорометил)хіназолін-4(3H)-ону залежить від наявності замісника біля термінального атома карбону алільного фрагмента. Варіювання виду замісника біля термінального карбону аліла дозволяє управляти напрямком галоциклізації.

XX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 16-19 травня 2022 р.

Аксіментьєва О.І. 59	Курасова Ю.Д. 47	Повідайчик М.В. 24
Аніщенко А.О. 22	Кут Д.Ж. 27	Поджарський М.А. 32,40
Артеменко Ю. Є. 62	Кут М.М. 27	Полонський В.А. 47,51,53
Баланенко А.Д. 9	Кучай І. М. 49	Применко В. Г. 62,66
Більчук В.С. 14	Лагута О.В. 51	Пустільник С.В. 53
Борисенко І.О. 19	Лендел В.Г.27	Савчук Н.С. 6
Борщевич Л.В. 56	Макаренко Д. А. 66	Свалявин О.В. 24
Варгалюк В.Ф. 47,49,51,53	Мартинюк Г.В. 59	Сегеда О.А. 16
Варлан К. Є. 30,35,37	Маторіна К.В. 6	Середюк В. О. 49
Вишнікін А. Б. 16	Мірошніченко А.А. 56	Сидорова Л.П. 16
Гнесь О. В. 59	Мовчан А. А. 35,37	Синявський С.В. 42
Головко О. Є. 13	Могильна І.О. 9	Скляр Т.В. 51
Гречишкіна М. О. 69,	Нестеров А. М. 32	Смітюк Н. М. 9
Громова Д.С. 19	Нестерова О.Ю. 42,43	Стець Н.В. 51
Єлагіна О.А. 14	Новік Г. В. 62,66	Тараненко І.В. 40
Жук Л. П. 9	Огнева Т.В. 43	Хмельникова Л.І. 14
Іваненко А.В. 51	Онисько М.Ю. 24,27	Целич О.І. 24
Кашернюк А. О. 59	Онопрієнко І. Л. 30	Чернушенко О.О. 69
Косіцина О. С. 30	Осокін Є.С. 47,53	Шевцова К. Р. 37
Костолович М.І. 59	Островська Г.О. 69	
	Плясовська К. А. 49	
	Побегайлова А.О. 22	