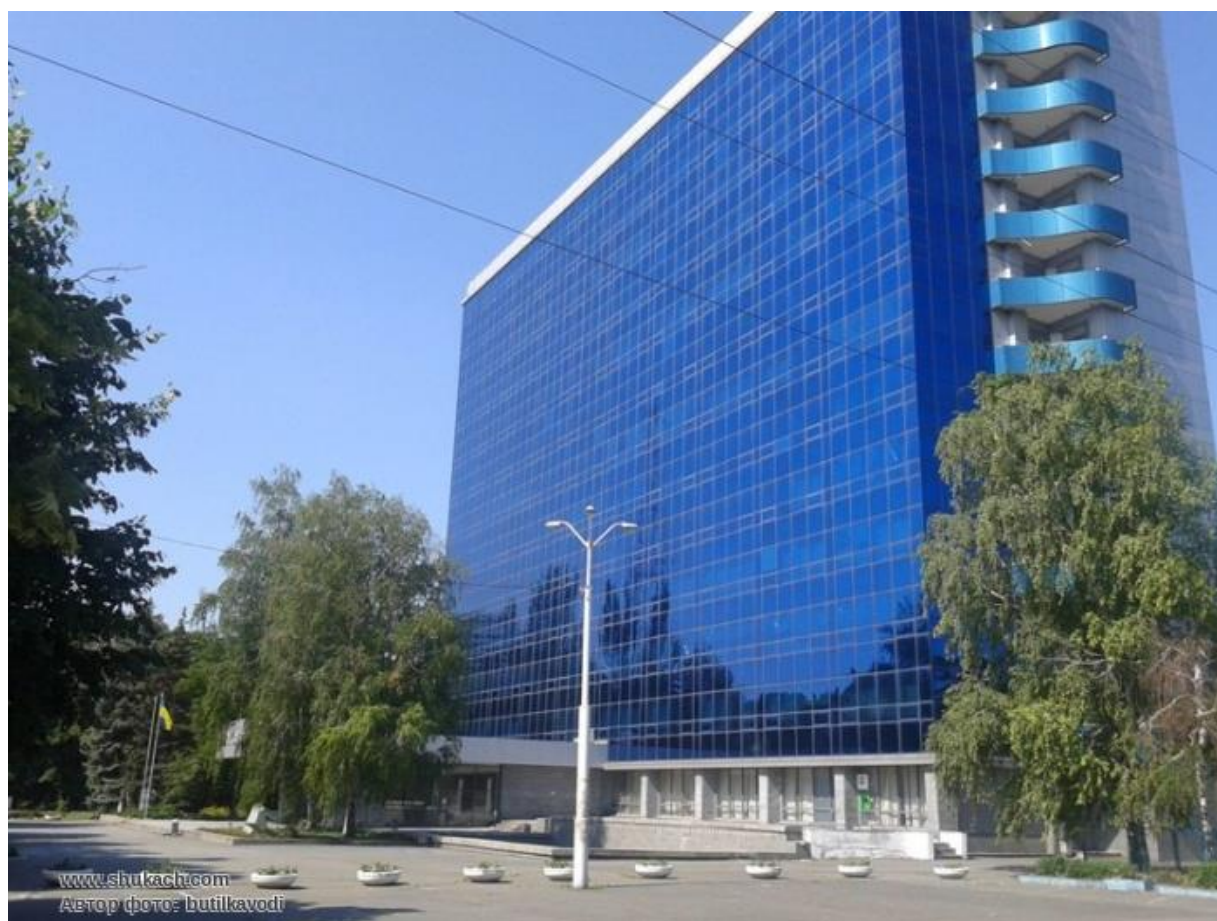


**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**Інститут органічної хімії
НАН України**

XXI ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
молодих вчених та студентів
з актуальних питань сучасної хімії



МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Дніпро
22-25 травня 2023 р.

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

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

**Інститут органічної хімії
НАН України**

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



Дніпро
22-25 травня 2023 р.

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

ПРОГРАМНИЙ ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ

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

Відповідальний секретар – *Маторіна Катерина Вячеславівна*, доцент кафедри аналітичної хімії та хімічної технології, канд. хім. наук, доцент

Шермолівч Юрій Григорович, заступник директора ІОХ НАН України, д-р хім. наук, професор

Оковитий Сергій Іванович, ректор ДНУ, д-р хім. наук, професор

Вишнікін Андрій Борисович, д-р хім. наук, професор

Стець Надія Вікторівна, зав. каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доцент

Варлан Костянтин Єлисейович, зав. каф. аналітичної хімії та хімічної технології ДНУ, канд. хім. наук, доцент

Кондратюк Наталія Вячеславівна, заступник декана з наукової роботи, зав. каф. харчових технологій ДНУ, канд. тех. наук, доцент

Петко Кирило Ігорович, с.н.с. ІОХ НАН України, канд. хім. наук

Матюшок Віктор Іванович, директор Науково-сервісної фірми «ОТАВА» (м. Київ)

Аніщенко Андрій Олександрович, доцент каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доцент

Пальчиков Віталій Олександрович, зав. НДЛ каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, ст. наук. співр.

Борщевич Лариса Вікторівна, доцент каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доцент

АДРЕСА ОРГКОМІТЕТУ:

Хімічний факультет (16 корпус),

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

вул. Козакова, 22

Дніпро, 49010, Україна

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 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 «XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії» Дніпро, 2023. - 97 с.

ISBN

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

**ДОСЛІДЖЕННЯ РЕГІОСЕЛЕКТИВНОСТІ ЕЛЕКТРОФІЛЬНОЇ
ГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЇ 3-АЛІЛ-2-ТІОКСО-7-ТРИФЛУОРОМЕТИЛ-
2,3-ДИГІДРОХІАЗОЛІН-4(1H)-ОНУ**

Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю.

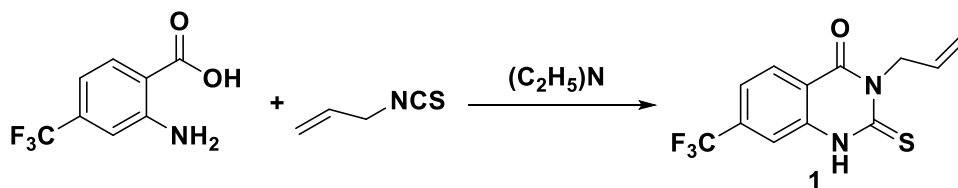
Державний вищий навчальний заклад

«Ужгородський національний університет»

diana.kut@uzhnu.edu.ua

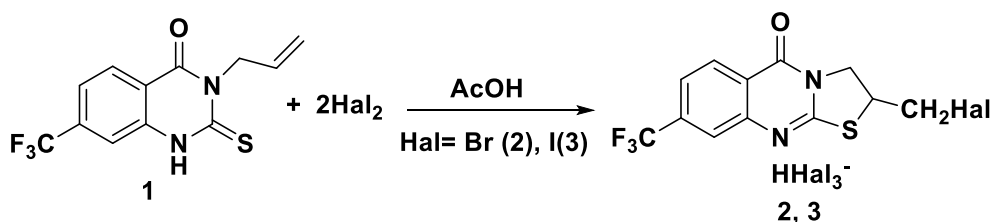
Хіназоліни є класом конденсованих гетероциклів, які становлять значний інтерес через різноманітний спектр їх біологічних властивостей. Багато заміщених похідних хіназоліну проявляють цілу низку біоактивностей, такий як протималарійна, протипухлинна, протимікробна, протигрибкова, противірусна, протипротозойна, протизапальну, сечогінну, міорелаксуючу, протитуберкульозну, протисудомну, акарицидну та багато інших біологічних активностей. Хіназолінові похідні використовуються для синтезу різних синтонів в синтетичній органічній хімії, а також вони присутні в молекулах різних ліків. Одним із найефективніших та зручних методів одержання конденсованих хіназолінів є електрофільна внутрішньомолекулярна циклізація з використанням різних електрофільних агентів. Метою даної роботи являється синтез біологічно перспективних конденсованих хіназолінів та дослідження регіохімії процесу електрофільної циклізації 3-аліл-2-тіоксо-7-трифлуорометил-2,3-дигідрохіназолін-4(1H)-ону під дією галогеновмісних електрофілів.

Вихідний 3-аліл-2-тіоксо-7-трифторометил-2,3-дигідрохіназолін-4(1H)-он **1**, одержано нагріванням 4-трифторометилантранілової кислоти з аліл ізотіоціанатом в середовищі триетиламіну.

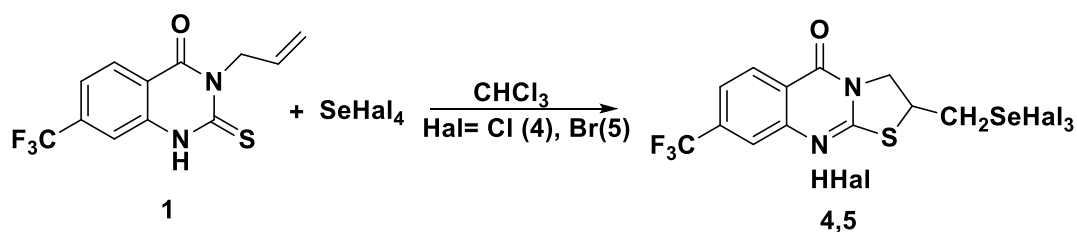


3-Аліл-2-тіоксо-7-трифторометилхіназолін-4-он **1** має декілька нуклеофільних центрів для атаки електрофільних реагентів - кратний зв'язок алкенільного замісника, екзоциклічні атоми кисню та сульфуру, що дає можливість дослідити регіохімію процесу електрофільної внутрішньомолекулярної циклізації. Важливим є також вивчення впливу електроноакцепторної трифторометильної групи на процес циклізації. Як галогеновмісні електрофільні реагенти використано галогени (бром, йод), тетрагалогеніди халькогенідів та арилтелуртрихлориди.

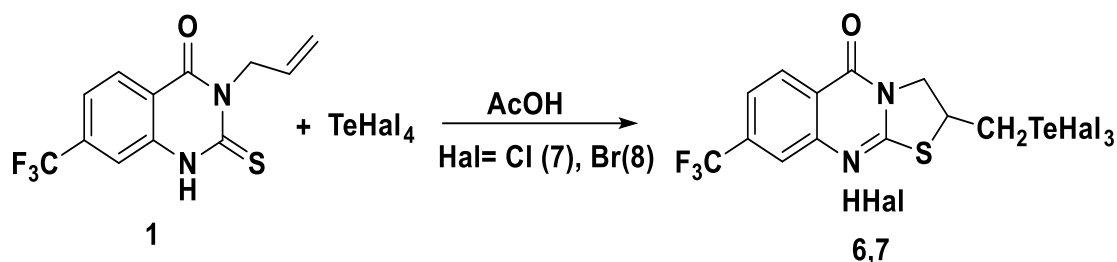
Перемішування N-аліл-2-тіоксо-7-трифторометилхіназолін-4-ону **1** з двократним надлишком галогену (бром 6 годин, йод 24 години) в льодяній оцтовій кислоті при кімнатній температурі приводить до регіоселективного анелювання тіазолінового циклу до остова хіназоліну з утворенням лінійних тіазолохіназолінів **2, 3**. Утворення тіазолохіназолінів лінійної будови **2, 3** підтверджено спектрами ЯМР та ІЧ-спектрами. Циклізація на атом сульфуру з утворенням продуктів циклізації лінійної будови підтверджується наявністю інтенсивних смуг поглинання карбонільної групи в ІЧ-спектрі сполук **2, 3** при 1675 та 1721 cm^{-1} відповідно. Дані елементного аналізу сполук **2, 3** вказують на утворення 2-(галогенометил)-8-(трифторометил)-2,3-дигідро-5H-[1,3]тіазоло[2,3-b]хіназолін-5-ону **2,3** у вигляді солей.



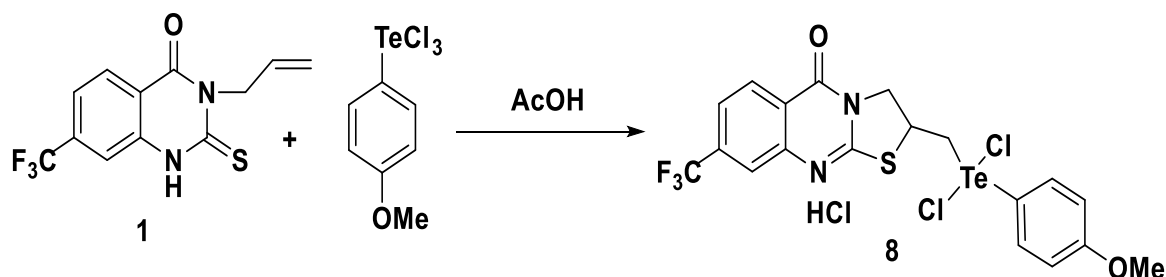
Використання тетрагалогенідів селену та телуру в реакції електрофільної циклізації з CF_3 -заміщеним тіоксохіназолоном **1** дозволить отримувати потенційно біологічно активні халькогенфункціоналізовані конденсовані хіназоліни. Такі електрофільні реагенти в реакціях з алкенільними ациклічними та гетероциклічними сполуками можуть утворювати як продукти приєднання, так і циклізації. Тетрагалогеніди халькогенів отримували *in situ* взаємодією діоксиду селену чи телуру з шестикратним надлишком відповідної галогеноводневої кислоти. Проведення реакції тетрагалогенідів селену з 3-аліл-2-тіоксо-6-трифторометилхіназолін-4-оном **1** в середовищі льодяної оцтової кислоти приводило до осмолення реакційної суміші та екструзії селену. Натомість реакція в середовищі хлороформу відбувається регіоселективно і приводить до утворення гідрогалогенідів 2-[(тригалогеноселено)метил]-8-(трифторо)-2,3-дигідро-5H-[1,3]тіазоло[2,3-b]хіназолін-5-онів **4, 5** лінійної будови. Про утворення гідрогалогенідів з анельованим тіазольним циклом свідчать спектри ЯМР ^1H , ^{13}C , ІЧ-спектри та елементний аналіз.



При використанні тетрагалогенідів телуру в реакції з 3-аліл-2-тіоксо-7-трифторометил-2,3-дигідрохіназолін-4(1H)-оном **1** в оцтовій кислоті відбувається циклізація з утворенням стійких телуртрихлоротіазолінохіназолінів **6,7**. Спектральні дані добре корелюють з селеновмісними аналогами **4,5**.



Для вивчення впливу арильного замісника в халькогеновмісному електрофілі на проходження електрофільної гетероциклізації використано *n*-метоксифенілтелуртрихлорид. Реакція хіназоліну **1** та *n*-метоксифенілтелуртрихлориду в льодяній оцтовій кислоті відбувається регіоселективно з утворенням тiazолохіназоліну лінійної будови з екзоциклічним атомом телуру — 2-{[дихлоро(4-метоксифеніл)-телуру]метил}-8-(трифторометил)-2,3-дигідро-5*H*-[1,3]тіазоло[2,3-*b*]хіназолін-5-ону **8**.



Таким чином, досліджено регіохімію електрофільної циклізації 3-аліл-2-тіоксо-6-трифторометил-2,3-дигідрохіназолін-4(1*H*)-оном під дією різних галогеновмісних електрофільних реагентів та отримано потенційно біологічно активні халькогеновмісні тiazолохіназоліни лінійної будови. Визначено, що природа електрофілу та наявність трифторометильного замісника не впливає на регіохімію процесу.

XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2023 р.

Агаян А.Р. 82	Косіцина О. С. 55	Пешук Є.С.79
Аксіментьєва О.І. 73	Костолович М.І.	Пирожок А.А. 52
	Крилкіна А.І. 28	Плясовська К. А. 76
Балич І. 12,14	Куліш Б.І. 62	Поджарський М.А. 49
Бондаренко М. 31	Курасова Ю.Д. 66	Полонський В.А. 66,70
Братичак М. 52	Кут Д.Ж. 41	Присяжна О. 14
Бурячишен Н. 12,14	Кут М.М. 41	Пустильнік С.В. 70
	Кучай І. М. 76	
Варгалюк В.Ф. 66,70,76	Кучеренко. А.М. 58	Романовська А.О. 16
Вітрук Я. 12		
Вишнікін А. Б. 16,31,38	Лагута О.В. 70	Савчук Н.С. 6
	Лазаревич Я.Д. 92	Салигіна Т.П. 45
Гайда А. 12,14	Лебідь А.І. 55	Сидорова Л.П. 20,25
Головко О. Є. 16	Левицький В.Є. 62	
Гречишкіна М. О.	Лінко Т.А. 20	Тараненко І.В.
Громова Д.С. 25		Токар А.В. 45
	Мартинюк Г.В. 73	Травнікова В.В. 95
Денисенко Т.О. 79	Масюк А.С. 62	
Дралевський М.С. 31	Маторіна К.В. 6,10	Українська Д.Е. 34
Дулєбова Л. 58	Мацук Ю. А. 88, 95	
	Могильна І.О. 9	Хмельникова Л.І. 28
Жданкін А.Є. 31	Моравський В.С. 58	
Жук Л. П. 34	Мосейчук Т. О. 73	Чернушенко О.О. 82,85
Журіда Ю.В. 85		Чернявська О.Ю. 38
	Нестеров А. М. 34, 49	Чопик Н.В. 52
Земке В.М. 52		
	Онисько М.Ю. 41	Шевцова К. Р.
Кечур Д.І. 62	Оскаленко А. Є. 88	
Киричок О. 12,14	Осокін Є.С. 66	Яцков М. В. 73
Клімова О. 14	Островська Г.О.	
Ковальчук М. О. 73		
Кондратенко Л.С. 10	Пелих С. 12,14	