

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.
ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра органической и биоорганической химии

**Синтез и строение тиазолопиримидинов на основе 2-аминотиазола и
оксосоединений**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студентки IV курса 412 группы

направления 04.03.01 – «Химия»

Института химии

Шепелевой Анны Сергеевны

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

профессор, д.х.н., профессор
должность, уч. степень, уч. звание

подпись, дата

А.П. Кривенько

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой

профессор, д.х.н., профессор
должность, уч. степень, уч. звание

подпись, дата

О.В. Федотова

инициалы, фамилия

Саратов 2020

Актуальность работы. Тиазолопиримидины находят широкое практическое применение в различных областях: в качестве бактерицидов и фунгицидов, противораковых и противомаларийных агентов, антиоксидантов, а также антикоррозионных добавок. Однако тиазолопиримидины являются менее изученными, чем их азотистые аналоги – три(тетр)азолопиримидины – , что определяет актуальность исследований в данном направлении.

Ранее на кафедре органической и биоорганической химии СГУ был осуществлен синтез тиазолопиримидинкарбоксилатов посредством трехкомпонентной конденсации 2-аминотиазола, ацетоуксусного эфира ароматических альдегидов. Однако отсутствовали экспериментальные подтверждения схемы формирования продуктов, что предопределило постановку настоящей работы.

Цель работы: синтез и изучение путей образования тиазолопиримидинкарбоксилатов и их гидроксिलированных аналогов.

Задачи работы:

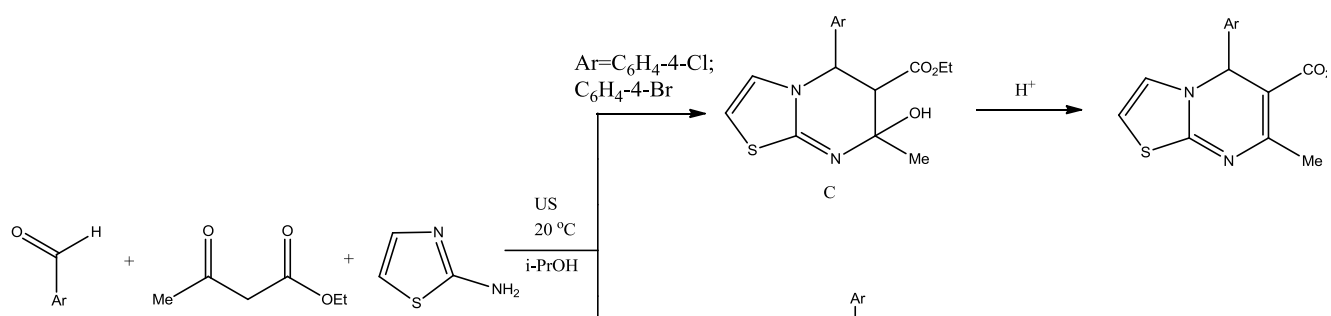
- Воспроизведение синтеза 2-гидрокситиазолопиримидинкарбоксилатов
- Выявление пути образования гидроксизамещенных тиазолопиримидинкарбоксилатов при one-pot синтезе (2-аминотиазол – ароматический альдегид – ацетоуксусный эфир)
- Дегидратация 2-гидрокситиазолопиримидинкарбоксилата и установление строения продукта с помощью спектра ЯМР ^1H
- Прогноз вероятной биологической активности тиазолопиримидинкарбоксилатов с помощью предикт-программы PASS

Работа выполнена на 47 страницах машинописного текста. Состоит из введения, первой главы «2-Аминотиазол в построении конденсированных гетероциклических систем (литературный обзор)», второй главы «Цель исследования и обсуждение результатов», третьей главы «Экспериментальная часть», выводов. Содержит 12 таблиц, 3 рисунка, список использованной литературы (содержит 25 наименований).

Основное содержание работы

В качестве объектов исследования были выбраны 2-гидрокситиазолпиримидинкарбоксилаты, содержащие *p*-Br(*p*-Cl) фенильные заместители, синтез которых осуществлен по известным методикам. Константы полученных соединений и их спектральные характеристики полностью совпали с литературными данными.

Была осуществлена дегидратация тиазолпиримидинкарбоксилата, содержащего хлор в пара-положении бензольного кольца, в условиях кислотного катализа. При этом был выделен ранее неописанный тиазолопиримидинкарбоксилат, строение которого установлено с помощью спектра ЯМР ¹H.



Полученные результаты подтверждают строение исследуемых тиазолопиримидинов и позволяют сделать вывод, что образование тиазолопиримидинкарбоксилатов **D** протекает не через предполагаемые гидроксированные предшественники **C**. Формирование этих гетеросистем протекает автономно согласно схеме, предложенной ранее, что позволяет прогнозировать синтез тиазолопиримидинкарбоксилатов или 2-гидрокситиазолопиримидинкарбоксилатов в зависимости от строения альдегидной компоненты в изучаемых реакциях. Переход к тиазолопиримидинкарбоксилатам, содержащим электронодонорные арильные

заместители, возможен только через предварительный синтез из гидроксированных предшественников с последующей дегидратацией.

Был выполнен прогноз спектра биологической активности полученных соединений с использованием предикт-программы PASS.

Выводы:

1. Воспроизведен синтез арилзамещенных тиазолопиримидинов и их гидроксированных аналогов.
2. Синтезирован ранее неописанный этил 5-(4-хлорфенил)-7-метил -5Н-тиазоло[3,2-а]пиримидин-6-карбоксилат, строение которого установлено с помощью спектра ЯМР ¹H.
3. Обсуждены схемы и получено экспериментальное подтверждение образования тиазолопиримидинкарбоксилатов и 2-гидрокситиазолопиримидинкарбоксилатов при one-pot взаимодействии тиазол-2-амин, ацетоуксусного эфира и ароматических альдегидов.
4. Осуществлен прогноз биологической активности синтезированных соединений с использованием предикт-программы PASS