

¹Санкт-Петербургский государственный университет,
199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9,
s.baykov@spbu.ru

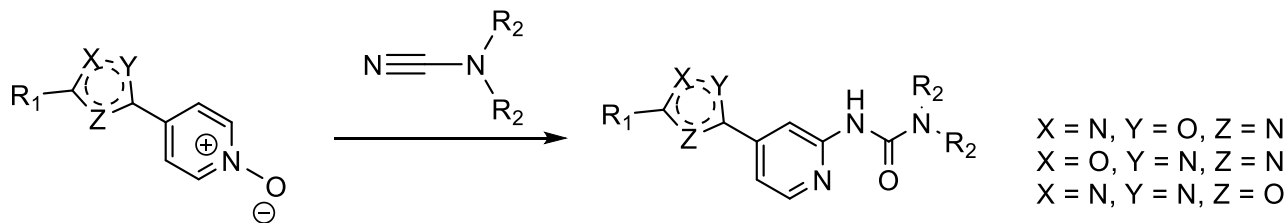
π-π СТЭКИНГ С УЧАСТИЕМ ОКСАДИАЗОЛЬНОЙ СИСТЕМЫ*

Ключевые слова: гетероциклы, нековалентные взаимодействия, π-π СТЭКИНГ, мочевины.

Нековалентные взаимодействия оказывают значительное влияние на свойства молекулярных и супрамолекулярных систем, включая фармакологический профиль фармацевтических препаратов [1]. В частности точность «докинга» потенциального лекарственного средства в активном сайте биологической мишени зависит от полноты учёта данных взаимодействий.

Одним из классических и хорошо изученных нековалентных контактов является π-π СТЭКИНГ ароматических систем. Со стороны белков в нём обычно участвуют ароматические фрагменты фенилаланина, тиразина и триптофана. Поскольку в основе большинства лекарственных средств лежат гетероциклические скаффолды, исследование π-π СТЭКИНГОВЫХ взаимодействий с участием гетероциклов – важная и актуальная задача [2].

Ранее с помощью кислотно-катализируемого сочетания *N*-оксидов с диалкилцианамидами мы синтезировали серию *N*-пиридилмочевин, содержащих в 1,2,4- и 1,3,4-оксадиазольный заместитель в пиридиновом кольце [3].



В процессе работы была получена серия кристаллов, исследование структуры которых показало наличие π-π СТЭКИНГОВЫХ взаимодействий между оксадиазольным циклом и пиридиновым кольцом (рисунок 1а), либо между двумя оксадиазольными фрагментами (рисунок 1б).

Найденные СТЭКИНГОВЫЕ контакты были подтверждены квантово-химическими расчётами и топологическим анализом в рамках теории Бэйдера.

Проведённый поиск по кембриджской базе структурных данных выявил ряд других производных оксадиазолов, в кристаллах которых имеются аналогичные взаимодействия.

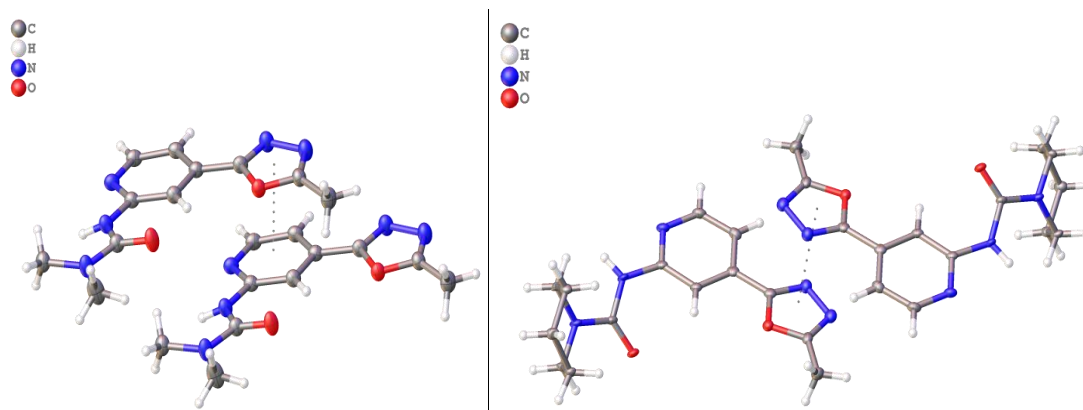


Рисунок 1. π - π стэкинг в *N*-пиридилмочевинах: а) между оксадиазолом и пиридином; б) между двумя оксадиазолами

Список литературы

1. Zhou P., Huang J., Tian F. // Current Medicinal Chemistry. 2012. Vol. 19. P. 226–238.
2. Bootsma A. N., Doney A. C., Wheeler S. E. // J. of the Americal Chemical Society. 2019. Vol. 141. P. 11027–11035.
3. Geyl K., Baykov S., Tarasenko M. et al. // Tetrahedron Letters. 2019. Vol. 60. P. 151108.

* Работа выполнена при поддержке грантов Совета по грантам Президенте РФ МК-1074.2020.3 и РФФИ 18-03-00119а.

УДК 547.237

М. А. Барабанов¹, Г. С. Мартьянов^{1,2}, А. В. Пестов^{1,2}

¹Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН,
620137, Россия, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 22,

²Уральский федеральный университет
им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
620078, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 28,
flimsey@mail.ru

СПОСОБ СИНТЕЗА ПРОСТЕЙШИХ ПОЛИАМИНОВ

Ключевые слова: полиамины, диамины, алкилирование, α,ω -дифтали-мидоалканы.

Простейшие полиамины **1** ($n = 3-5$) присутствуют в живых организмах и обладают разнообразной биологической активностью. Например, путресцин **1b**