

5-(2-АМІНОФЕНІЛ)-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОНИ ТА S-ЗАМІЩЕНІ: СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ

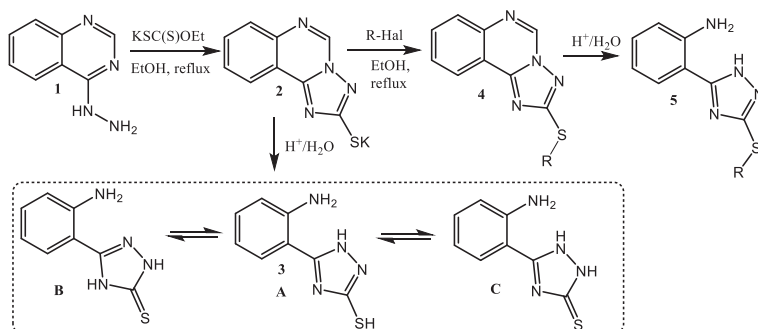
Волченко Д. С., Коваленко С. І., Оковитий С. І.

НДІ хімії та геології, Дніпровський національний університет ім. Олеся Гончара,
Дніпро, Україна
kovalenkosergiy@gmail.com

1,2,4-Триазолі та їхні похідні – важливий клас сполук, які знайшли застосування в сільському господарстві як регулятори росту рослин, у промисловості як інгібітори корозії металів, енергетичні матеріали, як важливі компоненти у нових синтетичних азобарвниках для посилення стійкості кольору та блискучих відтінків, у комплексах з металами проявляють здатність до фото- та електролюмінесценції, у медицині як хіміотерапевтичні агенти тощо. Важливо, що включення тіо-групи у положення С3 або С5 1,2,4-триазолу, її модифікація шляхом алкілування або додаткове введення до структури ароматичного замісника, у більшості випадків приводить до посилення хіміотерапевтичної дії. З огляду на важливість цих структур, за останні кілька десятиліть було опубліковано значна кількість робіт щодо розробки методів їх синтезу та біологічної активності. Аналіз результатів досліджень, спрямованих на синтез нових 1,2,4-триазол-тіонів показав, що зазвичай він включає естерифікацію карбонових кислот, їх гідразіноліз, утворення 2-ацилгідразин-1-карботіоамідів та лужна циклізація до відповідних тіонів. Проте, на сьогодні все більшого значення набувають альтернативні методи синтезу, які дають можливість спростити підходи до синтезу, одержати та удосконалити оригінальні структури.

Цікавими в даному аспекті є маловідомі 5-(2-амінофеніл)-1*H*-1,2,4-триазол-3-тіолі (**3**) та їх S-заміщені (**5**), 1,5-бінуклеофіли, які можуть бути різносторонньо використані як для побудови нових гетероциклів, так і їх структурної модифікації. Нами розроблено метод синтезу сполуки **3** та **5**, який включав формування тіовмісної гетероциклічної системи (**2**) з 4-гідразінохіназоліну, її алкілування для синтезу сполук **4**. Нуклеофільна деградація піримідинового циклу у сполуках **2** та **4** привела до цільових сполук з високим виходом (схема).

Схема



Важливо, що для синтезованих сполук **3** та **5** характерна тіон-тіольна таутомерія (А-С) (наведена на прикладі сполуки **3**, без урахування конформерів), яка у перспективних планах буде досліджена з використанням квантово-хімічних та експериментальних підходів. Крім того, аналіз впливу *o*-амінофенільного замісника на таутомерну рівновагу у полярних та неполярних розчинниках дозволить визначитися з напрямками формування нових гетероциклів.