

УДК 544.18

КУПРОКАТАЛІТИЧНЕ АРИЛСУЛЬФОНІЛЮВАННЯ 1,5-ДИФЕНІЛ-2,4-ПЕНТАДІЄН-1-ОНУ

Є. Біла

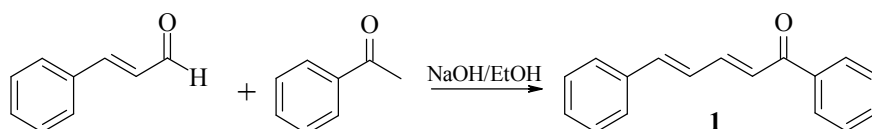
*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна
e-mail: bila.evgenia@gmail.com*

Вивчено купрокаталітичне арилсульфонілювання 1,5-дифеніл-2,4-пентадієн-1-ону солями арендіазонію та оксидом сульфуру(IV). Одержано 5-арилсульфоніл-1,5-дифеніл-2-пентен-1-они. Наведено їхні електронні спектри. Результати оцінки біологічної активності одержаних сполук за допомогою програмного пакета *Molinspiration* засвідчують, що вони мають потенційно високу активність як інгібітори ензимів і протеаз.

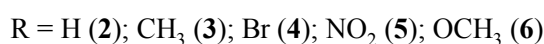
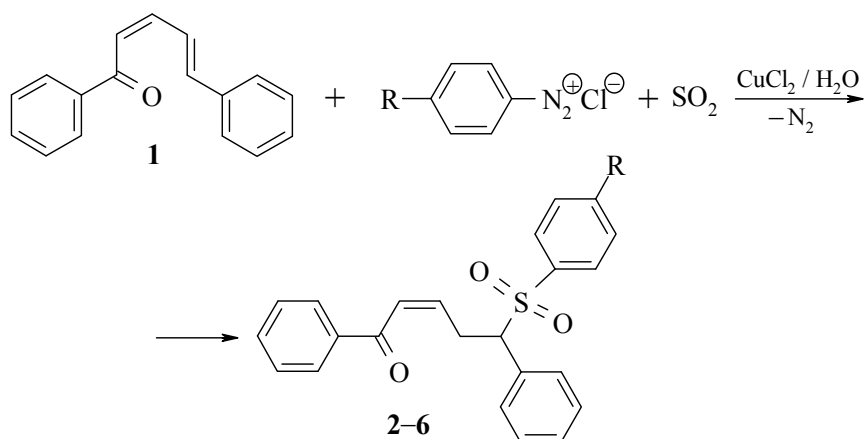
Ключові слова: пентадієнони, арилсульфонілкетони, купрокаталіз, арилсульфонілювання.

Наявність сульфонільної групи в органічних молекулах створює можливості варіювання їхньої хімічної архітектури, а також підвищує біологічну активність сполук [1]. Доступним методом одержання функціоналізованих сульфонів є мультикомпонентна взаємодія солей арилдіазонію, алкенів та оксиду сульфуру(IV) [2]. З огляду на те, що реакція ненасичених сполук з солями арендіазонію, зокрема реакція арилсульфонілювання, надзвичайно чутлива до структури алкену [2], ми вирішили вивчити в реакції арилсульфонілювання ненасичені оксосполуки зі спряженою системою подвійних зв'язків.

Конденсацією коричневого альдегіду та ацетофенону одержали 1,5-дифеніл-2,4-пентадієн-1-он **1** за такою схемою:



Арилсульфонілювання 1,5-дифеніл-2,4-пентадієн-1-ону **1** хлоридами арендіазонію **2** та SO₂ проводили за методикою, аналогічною до [3], за схемою



Виявлено, що внаслідок реакції відбувається приєднання арилсульфонільної групи й атома водню до подвійного зв'язку, причому регіонапрямленість реакції така ж, як і у випадку незаміщених халкону та дибензальацетону [3, 4]. Арилсульфонільна група вступає в β-положення до оксогрупи й утворюються 1,5-дифеніл-5-арилсульфоніл-2-пентен-2-они **2–6**.

Продукти **2–6** мають інтенсивне забарвлення від зеленого до червоного кольорів. Константи та виходи продуктів **2–6** наведені в таблиці.

У електронних спектрах сполук **2–6** простежуємо три основні смуги поглинання. Смуго поглинання λ¹ при 250–260 нм можна зачислити до поглинання арилсульфонільного фрагмента [5, 6]. Смуго λ² при 310–320 нм характерна для поглинання карбонільної групи і виявляється як плече смуги λ³. Цю останню смугу при 340–350 нм можна віднести до поглинання спряженої системи кратних зв'язків карбонільної групи та подвійного зв'язку [7, 8].

Одержані нами продукти арилсульфонілювання містять кілька фармакофорних фрагментів у молекулі, таких як халконовий фрагмент, нітро-, оксо-групи, атоми галогенів. Ми оцінили баланс різних молекулярних властивостей одержаних структур і їхньої біологічної активності на основі критеріїв лікоподібності Ліпінського за допомогою програмного пакета *Molinspiration* [9]. Результати розрахунків наведених сполук засвідчують, що для них характерна висока активність як інгібіторів ензимів і протеаз. Біологічна активність сполуки **2** близька до активності природних ферментів.

Експериментальна частина. УФ спектри записані на спектрофотометрі “Spectrophotometer NANODROP ND-1000” у режимі UVVis в етиловому спирті, концентрація – 1,0–1,2·10⁻⁴ моль/л.

3-Арилсульфоніл-1,3-дифеніл-1-пропанони 2–6 синтезували за методикою [3]. Продукти реакцій розділяли методом кристалізації з етилового чи ізопропілового спирту, діоксану, гексану та методом дробної екстракції. Індивідуальність речовин визначали методом тонкошарової хроматографії на незакріпленому шарі Al₂O₃ в системі різних розчинників.

Константи та виходи 5-арилсульфоніл-1,5-дифеніл-2-пентен-1-онів

Номер сполуки	Вихід, %	R	$T_{пл}$, °C	Знайдено, %	Брутто-формула	Обчислено, %
				S/Br/N		S/Br/N
2	53	H	В'язка рідина	8,33	C ₂₃ H ₂₀ O ₃ S	8,52
3	47	CH ₃	67	8,45	C ₂₄ H ₂₂ O ₃ S	8,21
4	38	Br	101	7,00/17,35	C ₂₃ H ₁₉ BrO ₃ S	7,04/17,55
5	45	NO ₂	114	7,44/3,36	C ₂₃ H ₁₉ NO ₃ S	7,36/3,22
6	55	OCH ₃	В'язка рідина	7,80	C ₂₄ H ₂₂ O ₄ S	7,89

1. *Simpkins N. S.* Sulfoxes in organic synthesis. Pergamon press, Oxford. Pergamon press. 1993.
2. Біла Є., Гануцак М. Аренсульфонілювання заміщених арилетенів // Праці НТШ. Сер. хем. і біохем. 2003. Т. 10. С. 76–89.
3. Біла Є. Є. 5-Арилсульфоніл-1,5-дифеніл-1-пентен-3-они // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. хім. 2008. Вип. 49. Ч. 2. С. 60–64.
4. Біла Є. Є., Канустей Г. М., Скоропад М. І. Арилсульфонілювання халкону та дибензальацетону солями бісарендіазонію та SO₂ // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. хім. 2009. Вип. 48. Ч. 2. С. 44–47.
5. *Naidu M. S. R., Peeran S. G.* Geometrical isomerism in unsaturated sulphide-sulphones and disulphones–1 // *Tetrahedron*. 1975. Vol. 31. P. 465–468.
6. *Талайкіне З. А., Талене В. Р., Видугирене В. И.* и др. Спектры S-содержащих ненасыщенных кислот и их производных. 3. УФ-спектры ненасыщенных кислот и их производных, содержащих алкилсульфинильные и -сульфонильные группы // Тр. АН Лит. ССР. Сер. Б. 1985. Т. 4 (149). С. 73–79.
7. *Харгиттаи И.* Структурная химия соединений серы. М.: Наука, 1986. С. 166–169.
8. Біла Є., Дзіковська М. Особливості електронних спектрів 1,3-дифеніл-3-арилсульфо-ніл-1-пропанонів. // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. хім. 2011. Вип. 52. С. 238–243.
9. Molinspiration Cheminformatics: <http://www.molinspiration.com/cgi-bin/properties>.

**CUPROUS CATALYTIC ARENESULPHONYLATION
OF 1,5-DIPHENYL-2,4-PENTADIENE-1-ONE**

E. Bila

*Ivan Franko National University of Lviv,
Kyryla & Mefodiya Str., 6, 79005 Lviv, Ukraine
e-mail: bila.evgenia@gmail.com*

The cuprous catalytic arylsulphonylation of 1,5-diphenyl-2,4-pentadiene-1-on with arenediazonium salts and sulphur oxide(IV) was performed. The reaction was determined to produce 5-arylsulphonyl-1,5-diphenyl-2-penten-1-ones for which electronic spectra were obtained. Prediction of biological activities of the compounds with *Molinspiration* software indicate potentially high activity as inhibitors of enzymes, particularly as inhibitors of proteases.

Key words: pentadienones, arenesulphonyl ketone, cuprous catalysis, arenesulphonilation.

Стаття надійшла до редколегії 03.11.2015
Прийнята до друку 12.01.2016