

ТІО-, АМІНОНАФТОХІНОНОВІ ПОХІДНІ ПРОСТОРОВО ЕКРАНОВАНОГО ФЕНОЛУ

Хом'як С.В., Губрій З.В., Лубенець В.І., Новіков В.П.

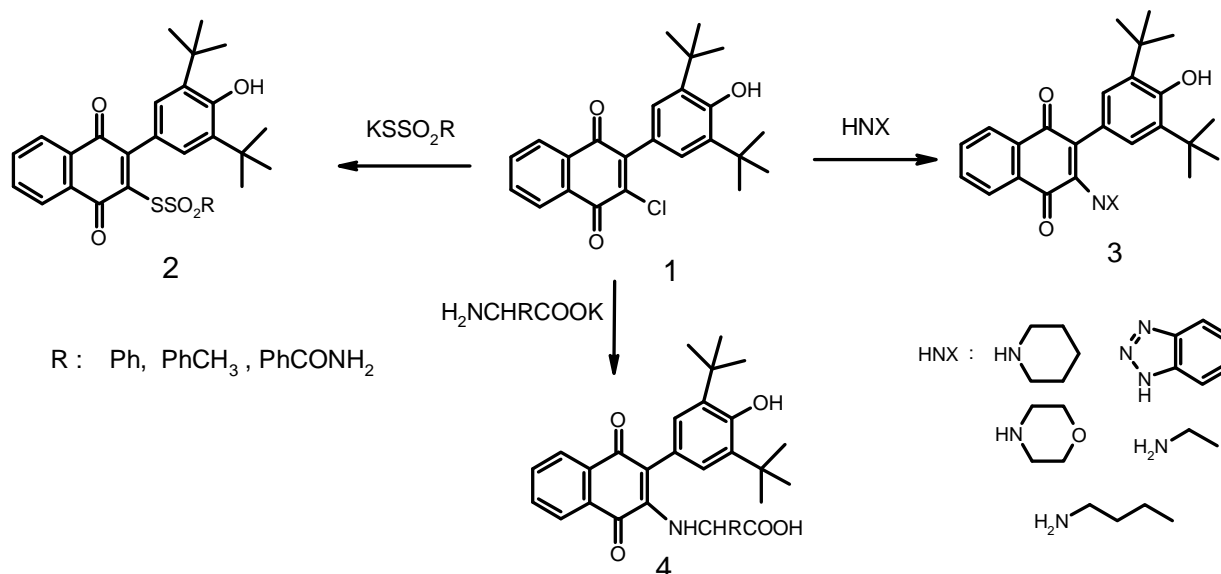
Національний університет «Львівська політехніка»,

вул.С.Бандери 12, 79013 Львів, Україна, vnovikov@polynet.lviv.ua

Просторово екрановані феноли посідають перше місце серед промислових антиоксидантів. Встановлено, що сполуки з 2,6-ди-*трет*-бутил-фенолом виступають селективними інгібіторами ферментів як СОХ-2, так і 5-LOX, завдяки чому є ефективними в пригніченні росту ракових пухлин. Похідні нафтохінонів володіють різноманітною фізіологічною активністю, особливо, включаючи цитотоксичність до ракових клітин.

Поєднання в одній молекулі екранованого фенольного, нафтохінонового, а також амінного та тіольного фрагменту може проявлятися в високій ефективності антиоксидантів, інгібіторів СОХ-2, 5-LOX, фунгіцидів такого типу.

Реакцію з первинними і вторинними амінами проводили при кип'ятінні в толуольному розчині 2-хлоро-3-(3,5-ди-*трет*-бутил-4-гідроксифеніл)-1,4-нафтохінону **1**, відповідного аміну та з додаванням триетиламіну як акцептора НСІ. Реакції нафтохінону **1** з калієвими солями арилтіосульфатів проводили при нагріві в ацетоні. Взаємодію калієвих солей амінокислот проводили при нагріві в етанолі.



Сполуки було перевірено за допомогою програми PASS на прогнозування спектру біологічної активності. Речовини виявились перспективними як такі, що з великою ймовірністю будуть проявляти протишемічну, протизапальну, антиоксидантну, протиракову активності, можуть використовуватись при лікуванні хвороби Альцгеймера тощо. Експериментальним біологічним скринінгом підтверджено, що нові біологічно активні сполуки проявляють антимікробну, фунгіцидну активність, яка прогнозувалось віртуальним скринінгом за програмою PASS.