

ПИРАЗОЛИНЫ И ПИРИМИДИНЫ НА ОСНОВЕ (*E*)-1-(4-ПЕНТИЛОКСИФЕНИЛ)-3-АРИЛПРОП- 2-ЕН-1-ОНОВ. СИНТЕЗ, ДОКИНГ-ИССЛЕДОВАНИЕ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА

© 2024 г. А. У. Исаханян^{1,*}, З. А. Овасян¹, Г. С. Григорян², Р. П. Мхитарян²,
Л. С. Габриелян², Г. А. Паносян¹, М. Ю. Дангян¹, А. С. Саргсян³,
А. А. Амбарцумян³, А. А. Арутюнян¹

¹ Научно-технологический центр органической и фармацевтической химии
Национальной академии наук Республики Армения,
Ереван, 0014 Армения

² Ереванский государственный университет, Ереван, 0025 Армения

³ Научно-производственный центр «Армбиотехнология»
Национальной академии наук Республики Армения, Ереван, 0056 Армения

*e-mail: anush.isakhanyan.51@mail.ru

Поступило в редакцию 6 июня 2024 г.
После доработки 19 августа 2024 г.
Принято к печати 21 августа 2024 г.

Конденсацией 1-(4-пентилоксифенил)этанона с ароматическими альдегидами в водно-этанольном растворе в присутствии NaOH получены (*E*)-1-(4-пентилоксифенил)-3-(арил)проп-2-ен-1-оны. Циклизацией замещенных халконов с фенилгидразином в кислой среде синтезированы соответствующие пиразолиновые производные, реакцией с гидрохлоридом бензамидина в системе КОН–этанол – 2,4,6-триарилзамещенные пириимидины. Установлено, что все синтезированные производные пиразолинов проявляют выраженные люминесцентные свойства. Проведено докинг-исследование соединений в отношении четырех типов рецепторов.

Ключевые слова: 1-(4-пентилоксифенил)этанон, (*E*)-1-(4-пентилоксифенил)-3-(арил)проп-2-ен-1-оны, циклоконденсация, пиразолины, пириимидины, люминесценция

DOI: 10.31857/S0044460X24050048, EDN: FKOGQZ

ВВЕДЕНИЕ

Высокая реакционная способность халконов, обусловленная их свойствами как 1,3-бизэлектрофильных синтонов делает их важными исходными соединениями для синтеза различных классов гетероциклических соединений. Реакции конденсации 1,3-диарилпропен-2-ен-1-онов (халконов) с участием 1,2-, 1,3- и 1,4-бинуклеофилов приводят посредством гетероциклизации к формированию, соответственно, пяти-, шести- и семичленных гетероциклов, в частности, пиразолинов и пириимидинов [1, 2].

Исследования по синтезу новых халконов ведутся как в направлении введения в состав халкона различных заместителей, в том числе и фармакофорных групп, так и в направлении синтеза из халконов новых веществ, прежде всего гетероциклических производных. Гетероциклические системы очень разнообразны. Наиболее хорошо изученными и широко распространенными являются пиразолины и пириимидины [3–5].

Пиразолины обладают широким спектром биологической активности, поэтому они играют большую

роль в медицинской химии. К действию пиразолинов можно отнести противогрибковое, противомикробное, противосудорожное, противотуберкулезное, противовоспалительное, противоопухолевое и противовирусное.

Пиримидины применяются как гербициды, инсектициды, фунгициды, бактерициды и производства химических веществ. Пиримидиновые основания широко распространены в животных, растительных тканях и в микроорганизмах. Производные пиримидина имеют широкое распространение, поскольку участвуют во многих биологических процессах [6–9].

Халконы, пиразолины и пиримидины также проявляют люминесцентные свойства. В медицине и биологии люминесценция используется для диагностики заболеваний, обнаружения и распознавания бактериальных микробов, изучения структуры, изменений клеток и белков при развитии заболеваний и производстве дневного света, ламп, рентгеновских экранов, красок [10–12].

Целью данной работы являлся синтез замещенных пиразолинов и пиримидинов на основе (*E*)-1-(4-пентилоксифенил)-3-арилпроп-2-ен-1-онов, установление закономерностей их образования,

особенностей строения, а также изучение их люминесцентных свойств и докинг-исследование.

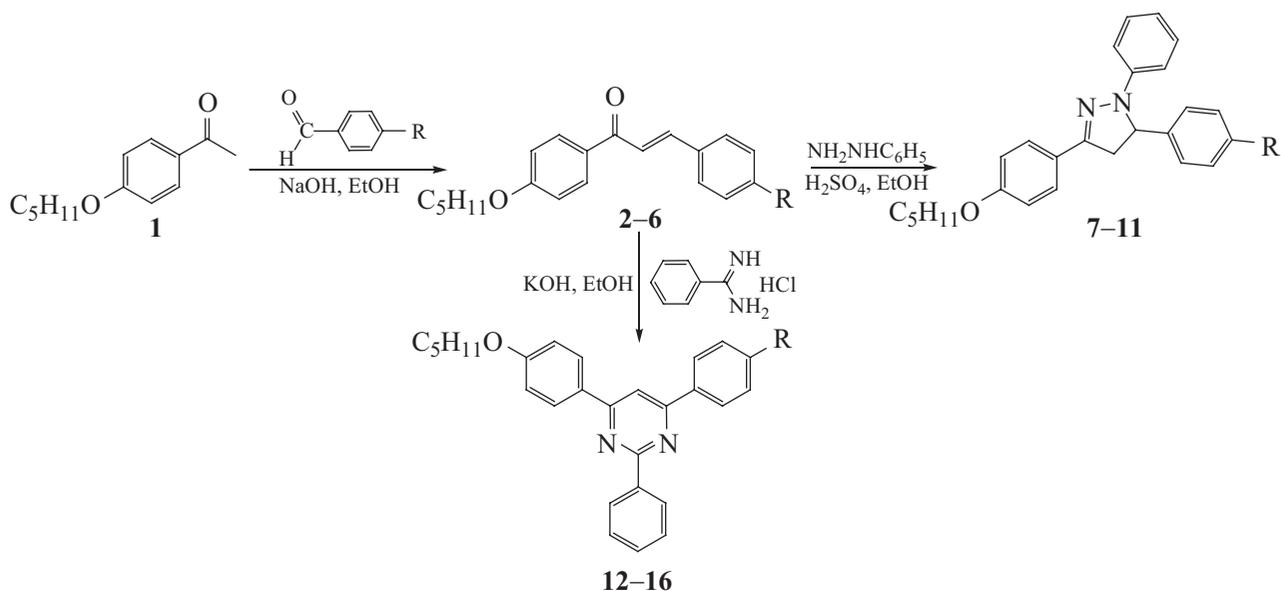
РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Реакцией конденсации 1-(4-пентилоксифенил)-этанона **1** с ароматическими альдегидами в водно-этанольном растворе в присутствии гидроксида натрия получены (*E*)-1-(4-пентилоксифенил)-3-арилпроп-2-ен-1-оны **2–6** (схема 1). Реакция циклизации полученных соединений **2–6** с фенилгидразином в кислой среде приводит к ранее неизвестным пиразолинам **7–11** [13, 14]. Синтез пиримидинов **12–16** осуществлен взаимодействием гидрохлоридов бензамидина с халконами **2–6** в системе KOH–этанол с получением ранее неописанных 2,4-диарил-6-(4-пентилоксифенил)пиримидинов **12–16** (схема 1) [15–19].

Строение полученных соединений подтверждено данными ЯМР ^1H , ^{13}C и ИК спектроскопии.

Электронные спектры поглощения соединений **2–16** регистрировали в растворах ДМФА при постоянной температуре ($25.0 \pm 0.3^\circ\text{C}$). В качестве раствора сравнения использовали ДМФА. Длины волн максимумов поглощения, а также рассчитанные значения молярной экстинкции представлены в табл. 1.

Схема 1.



R = H (**2**, **7**, **12**), OCH₃ (**3**, **8**, **13**), Br (**4**, **9**, **14**), NMe₂ (**5**, **10**, **15**), 1,3-бензодиоксол-5-ил (**6**, **11**, **16**).

Таблица 1. Длины волн максимумов поглощения, значения молярной экстинкции, длины волн максимумов флуоресценции, стоков сдвиг и квантовый выход соединений **2–16**.

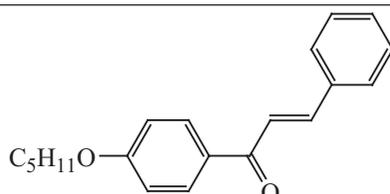
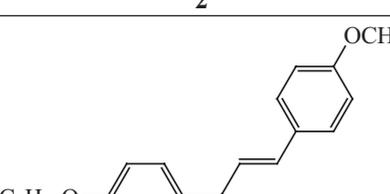
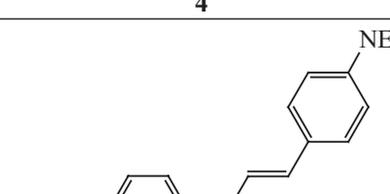
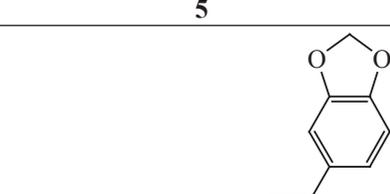
Соединение	λ_{max} , нм	ε , л·моль ⁻¹ ·см ⁻¹	$\lambda_{\text{em}}^{\text{max}}$, нм	Стоксов сдвиг, см ⁻¹ (нм)	Q
 2	321	34710	399	128205 (78)	0.004
 3	340	38370	399	169490 (59)	0.004
 4	323	33060	397	135135 (74)	0.005
 5	410	28780	516	94340 (106)	0.009
 6	311 354	15680 25250	397	116279 (86)	0.005

Таблица 1. Продолжение.

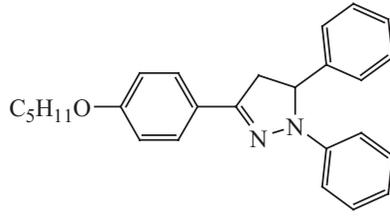
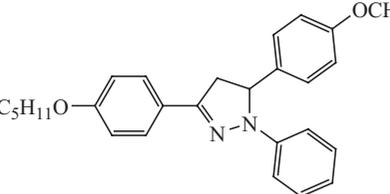
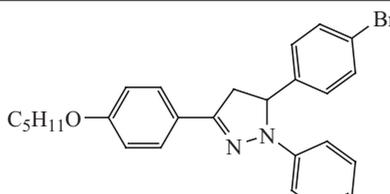
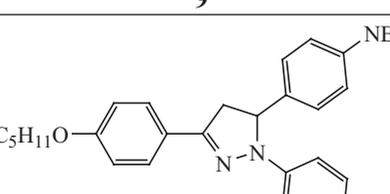
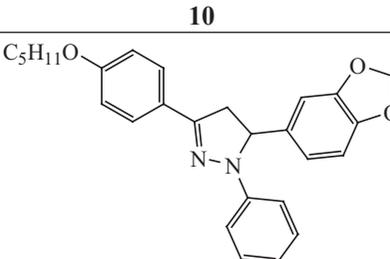
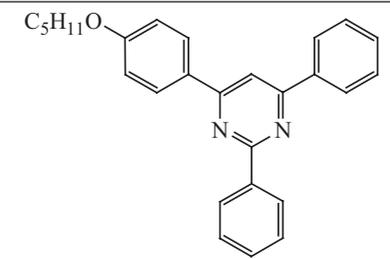
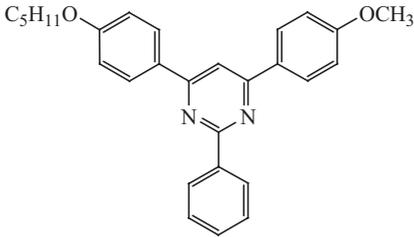
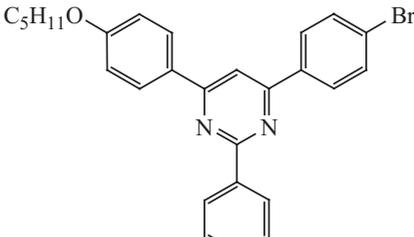
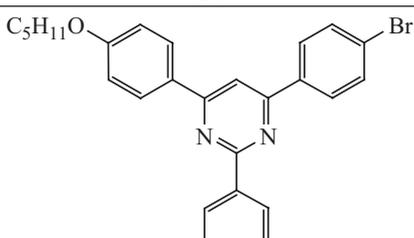
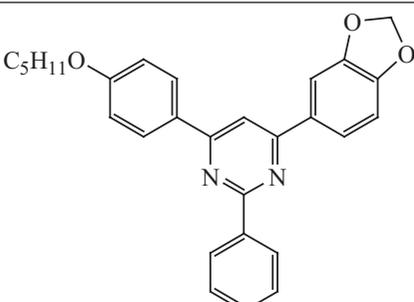
Соединение	λ_{\max} , нм	ε , л·моль ⁻¹ ·см ⁻¹	$\lambda_{\text{cm}}^{\max}$, нм	Стоксов сдвиг, см ⁻¹ (нм)	Q
 <p>7</p>	269 358	10920 19360	445	114943 (87)	0.858
 <p>8</p>	269 359	13570 25900	447	113636 (88)	0.759
 <p>9</p>	269 357	10180 21570	443	116279 (86)	0.630
 <p>10</p>	269 311 359	17620 10970 16110	447	113636 (88)	0.791
 <p>11</p>	269 297 357	7440 8530 14810	446	112360 (89)	0.792
 <p>12</p>	273 324	34180 19220	400	131579 (76)	0.036

Таблица 1. Окончание.

Соединение	λ_{\max} , нм	ε , л·моль ⁻¹ ·см ⁻¹	$\lambda_{\text{em}}^{\max}$, нм	Стоксов сдвиг, см ⁻¹ (нм)	Q
 <p>13</p>	278 295 328	37270 39530 26740	377	204082 (49)	0.035
 <p>14</p>	274 327	46190 24060	410	120482 (83)	0.105
 <p>15</p>	270 295 372	27760 26980 34600	493	82645 (121)	0.305
 <p>16</p>	274 298 335	25850 24890 22730	416	123457 (81)	0.434

Люминесцентные свойства полученных систем изучены методом флуоресцентной спектроскопии также в растворах ДМФА. Концентрация растворов составляла $2 \cdot 10^{-6}$ моль/л. Полученные спектры флуоресценции представлены на рис. 1–4. Как видно из рисунков, спектры флуоресценции исследуемых соединений характеризуются одной полосой

излучения с максимумом в области 377–516 нм. Максимумы флуоресценции и стоксов сдвиг также представлены в табл. 1.

Для определения квантового выхода синтезированных соединений в качестве стандарта использовали сульфат хинина, как один из наиболее часто используемых и упоминаемых в литературе [20, 21].

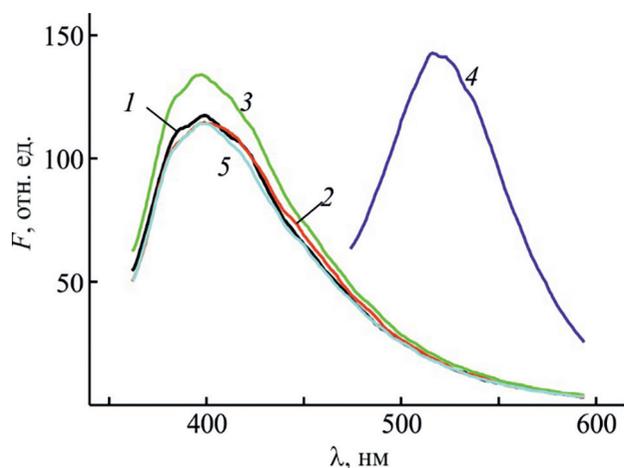


Рис. 1. Спектры флуоресценции образцов 2–6 (1–5) в растворах ДМФА ($c = 2 \cdot 10^{-6}$ моль/л, ширина щели возбуждения – 10 нм, ширина щели излучения – 10 нм).

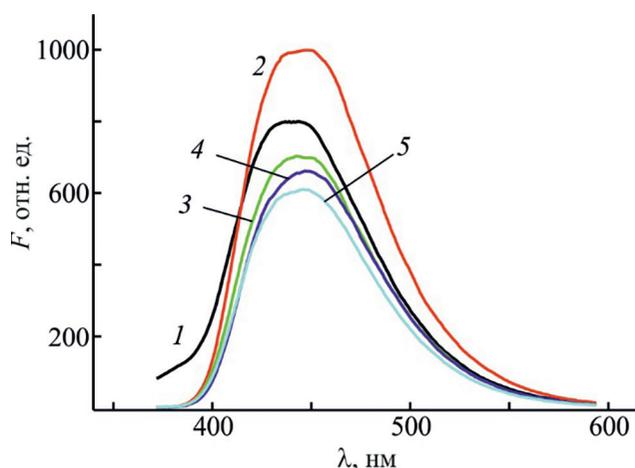


Рис. 2. Спектры флуоресценции образцов 7–11 (1–5) в растворах ДМФА ($c = 2 \cdot 10^{-6}$ моль/л, ширина щели возбуждения – 5 нм, ширина щели излучения – 5 нм).

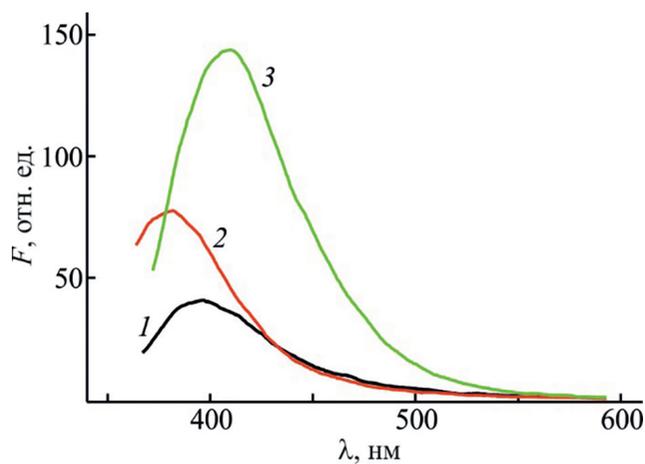


Рис. 3. Спектры флуоресценции образцов 12, 13 и 14 (1–3) в растворах ДМФА ($c = 2 \cdot 10^{-6}$ моль/л, ширина щели возбуждения – 5 нм, ширина щели излучения – 5 нм).

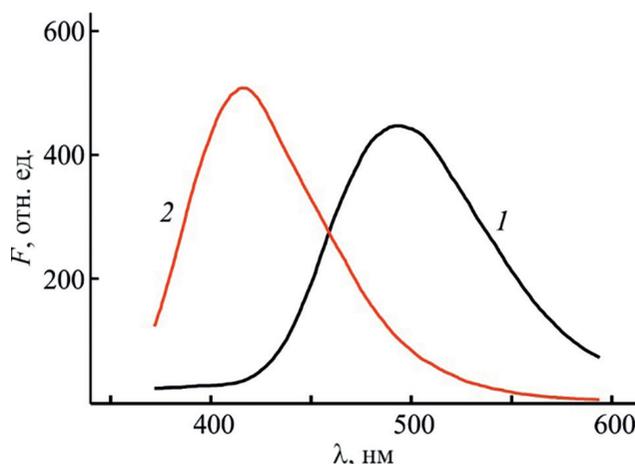


Рис. 4. Спектры флуоресценции образцов 15 (1) и 16 (2) в растворах ДМФА ($c = 2 \cdot 10^{-6}$ моль/л, ширина щели возбуждения – 5 нм, ширина щели излучения – 5 нм).

Полученные значения квантового выхода (Q) также представлены в табл. 1.

Таким образом, синтезированные нами производные халконов не обладают выраженными люминесцентными свойствами: имеют низкий квантовый выход. Остальные синтезированные соединения проявляют люминесцентные свойства, причем флуоресцентные излучения пиразолинов 7–11 имеют очень высокую интенсивность с квантовыми выходами 0.858, 0.759, 0.630, 0.791 и 0.792

соответственно. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности дальнейшего синтеза и изучения люминесцентных свойств в данном ряду пиразолинов.

Изучено взаимодействие синтезированных соединений 2–16 с рецепторами RdRp, EGFR, MAPK14, MAOB (табл. 2). Согласно полученным результатам, синтезированные соединения слабо взаимодействуют с РНК-зависимой РНК-полимеразой SARS-CoV-2. Среди них соединения 13 и 16 показывают срав-

нительно сильные взаимодействия с рецептором $DG_0 = -8.0$ и -8.2 ккал/моль соответственно). Все изучаемые соединения в докинг-экспериментах взаимодействуют с EGFR-, MAPK- и MAO-рецепторами с энергией на 2–3 порядка выше по сравнению с RdRp. В случае киназного домена EGFR человека энергия связывания для соединений **12**, **13**, **14**, **15**, **16** равна -10.0 , -10.1 , -10.3 , -10.1 и -10.3 ккал/моль соответственно. Остальные соединения также показывают достаточно сильные взаимодействия с этим рецептором. В случае фосфорилированной MAPK14 человека те же соединения взаимодействуют с $DG_0 = -10.4$, -10.0 , -10.3 , -10.5 и -10.3 ккал/моль соответственно. В случае моноаминоксидазы В человека соединения **4** и **13** проявляют сильное взаимодействие, $DG_0 = -10.0$ ккал/моль.

На рис. 5 (слева) представлены общие пространственные модели взаимодействий лиганда с рецепторами (в форме α -спиралей, β -щитов и петель), в правой части рисунка представлен молекулярный механизм взаимодействий лиганда с аминокислотными остатками рецепторов. Цепочками зеленых

шариков представлены водородные связи между лигандом и аминокислотными остатками рецепторов. Желтыми параллелепипедами представлены π - π взаимодействия.

Результаты докинга показывают, что в случае с 2xfn соединение **13** образует две водородные связи: со свободной карбоксильной группой Gln²⁰⁶ (длина связи 2.739 Å) и с гидроксильной группой Tyr⁴³⁵ (длина связи 3.084 Å), а также 2 π - π связи с Trp³⁸⁸ (длина связей 8.588 и 9.248 Å). При докинге с рецептором MAPK14 соединение **13** образует исключительно электростатические и другие слабые связи, однако этого оказалось достаточно для образования довольно хорошего взаимодействия. Та же ситуация повторилась и в случае с EGFR и 7btf. Из общих пространственных моделей взаимодействий следует также, что в случае рецепторов EGFR и MAPK14 соединение **13** взаимодействует по соседству с β -щитами, что соответствует активным центрам белков, и, следовательно, может быть причиной сильного конкурентного ингибирования изучаемых рецепторов.

Таблица 2. Значения энергий связывания и констант диссоциации для взаимодействия синтезированных соединений **2–16** с рецепторами RdRp, EGFR, MAPK14, MAOB.

Лиганд	Комплекс RdRp с NSP7 и NSP8 pdb 7btf		Киназный домен EGFR человека pdb 3W32		2-Фосфорилированный MAPK14 человека в комплексе с ATF2 pdb 6zqs		Моноаминоксидаза В человека в комплексе с 2-(2-бензофуранил)-2-имидазолием pdb 2xfn	
	DG_0 , ккал/моль	K_D , мМ.	DG_0 , ккал/моль	K_D , мМ.	DG_0 , ккал/моль	K_D , мМ.	DG_0 , ккал/моль	K_D , мМ.
2	-6.4	20.36	-8.9	0.299	-9.2	0.180	-9.2	1.917
3	-6.6	14.53	-9.0	0.253	-8.5	0.588	-8.5	1.917
4	-7.2	5.28	-9.2	0.180	-8.7	0.420	-8.7	0.047
5	-6.2	28.53	-9.3	0.152	-8.8	0.354	-8.8	0.055
6	-6.3	24.10	-9.5	0.109	-8.9	0.299	-8.9	2.686
7	-7.6	2.69	-9.7	0.078	-8.5	0.588	-8.5	0.253
8	-7.3	4.46	-9.3	0.152	-8.2	0.976	-8.2	3.765
9	-6.9	8.75	-9.6	0.092	-8.5	0.588	-8.5	6.246
10	-6.9	8.75	-9.3	0.152	-8.4	0.696	-8.4	1.619
11	-7.7	2.27	-9.8	0.066	-8.9	0.299	-8.9	0.420
12	-7.7	2.27	-10.3	0.028	-10.3	0.028	-10.3	2.269
13	-8.0	1.37	-10.0	0.047	-10.4	0.024	-10.4	0.047
14	-7.7	2.27	-10.1	0.039	-10.0	0.047	-10.0	0.214
15	-7.9	1.62	-10.1	0.039	-10.5	0.020	-10.5	0.299
16	-8.2	0.98	-10.3	0.028	-10.3	0.028	-10.3	0.109

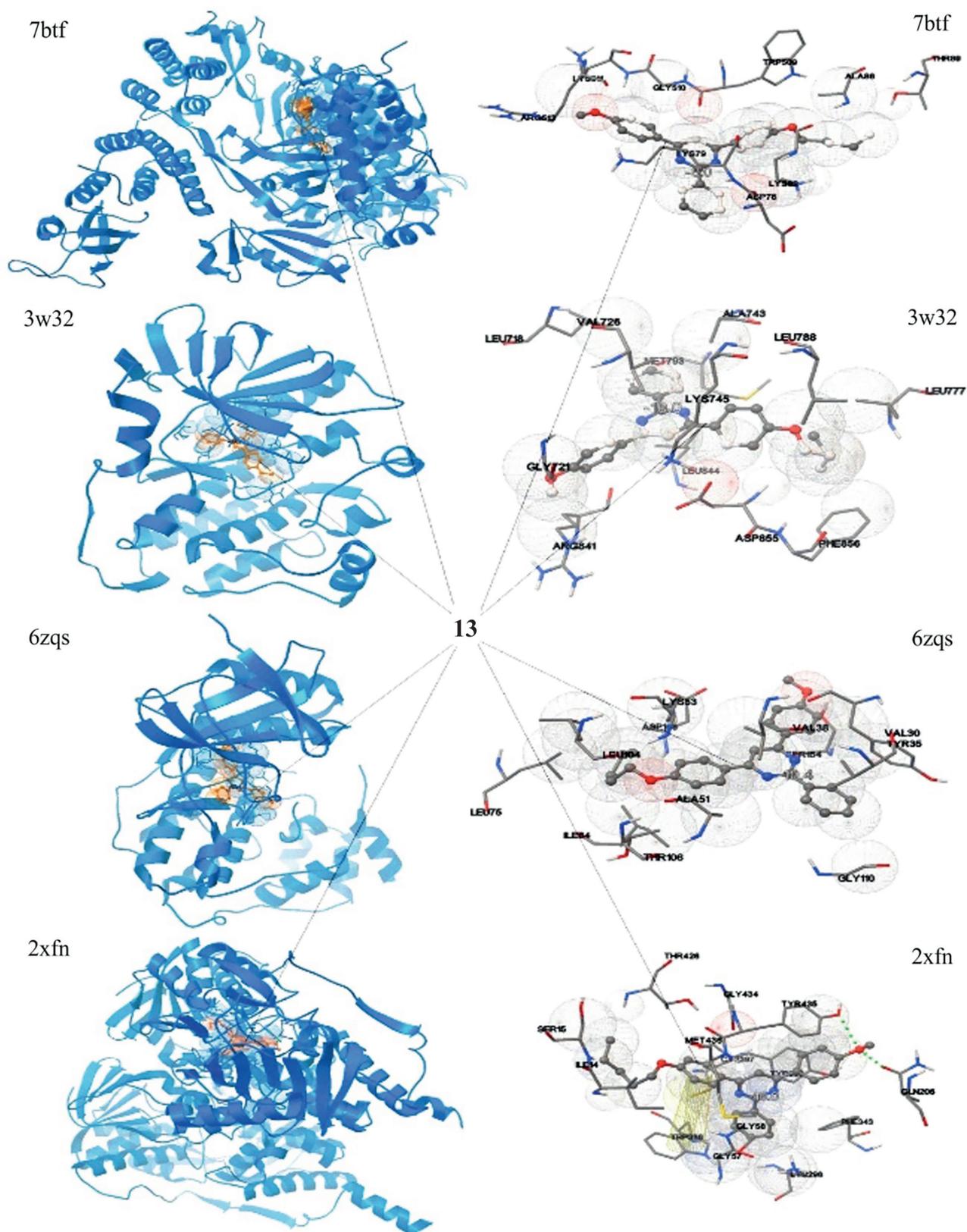


Рис. 5. Способы взаимодействия соединения 13 с рецепторами RdRp, EGFR, MAPK14 и MAOB.

ВЫВОДЫ

Таким образом, синтезированы новые пиразолины и пиримидины с 4-пентилоксигруппой в одном из ароматических колец гетероцикла, которые в отличие от исходных халконов обладают высокой люминесцентной активностью и высоким квантовым выходом, значительно более выраженными у производных пиразолинов. В результате докин-г-исследований выявлены отдельные соединения в ряду пиразолинов и пиримидинов, которые могут рассматриваться как перспективная основа для дальнейших исследований в поиске биологически активных соединений.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

ИК спектры сняты на приборе Nicolet Avatar 330 FT-IR в вазелиновом масле. Спектры ЯМР ^1H и ^{13}C зарегистрированы на спектрометре Mercury-300 Varian (300, 75 МГц) в ДМСО- d_6 - CCl_4 , внутренний стандарт – ТМС. Электронные спектры поглощения зарегистрированы в растворах ДМФА на спектрометре SPECORD 50PC при постоянной температуре ($25.0 \pm 0.3^\circ\text{C}$). Для поддержания постоянной температуры использовали термостат LAUDA A100, непосредственно подключенный к спектрометру. Измерения проводили с использованием кварцевых кювет с толщиной слоя поглощения, равной 1 см. В качестве раствора сравнения использовали ДМФА. Спектры флуоресценции регистрировали на спектрометре Varian Cary Eclipse в диапазоне длин волн 365–600 нм при длине волны возбуждения $\lambda_{\text{ex}} = 350$ нм. Ширина щелей возбуждения и излучения была одинаковой и составляла 5 нм для соединений 7–16 и 10 нм для соединений 2–6. Для измерений использовали кварцевую кювету с $l = 1$ см. Для определения квантового выхода в качестве стандарта был выбран сульфат хинина. Растворителем для приготовления раствора стандарта служил 0.1 М водный раствор серной кислоты с $Q_{\text{ст}} = 0.577$ [20]. Для измерения флуоресценции образцов готовили растворы с оптической плотностью < 0.05 , чтобы избежать влияния эффекта внутреннего фильтра. Для возбуждения стандарта и образцов была выбрана длина волны 350 нм, а ширина щелей возбуждения и излучения была одинаковой и составляла 5 нм. Температуры плавления определены на приборе Boetius.

Техника проведения докин-г-анализа и данные pdb для EGFR описаны ранее [22]. Файлы pdb макромолекул (рецепторов) были загружены из банка данных белков RSCB. Молекулярные модели исследуемых соединений были созданы в формате PDB с использованием пакета программ ChemBioDraw Ultra 12.0. Минимизацию свободной энергии соединений проводили с помощью программы MM2 в программном пакете ChemBioDraw Ultra 12.0. Молекулярные модели макромолекул и химических соединений были созданы в формате PDBQT с использованием программного пакета AutoDock Vina, как описано в работе [23]. AutoDock Vina также использовался для анализа результатов докин-га.

В докин-г-исследованиях лигандов с РНК-зависимой РНК-полимеразой (RdRp) SARS-Cov-2 использована модель кристаллической структуры RdRp SARS-Cov-2 в комплексе с белками NSP7 и NSP8 того же вируса (pdb 7BTF) с разрешением 2.95 Å, полученного криоэлектронным микроскопированием [24]. В докин-г-исследованиях лигандов с рецептором митоген-активируемой протеинкиназы 14 (MAPK14 или p38 α) использована модель кристаллической структуры дважды фосфорилированной MAPK14 человека в комплексе с ATF2 (pdb 6ZQS) с разрешением 1.95 Å полученного рентгеноструктурным анализом [25]. В докин-г-исследованиях лигандов с рецептором эпидермального фактора роста (EGFR) использована рентгеновская кристаллическая структура киназного домена EGFR человека в комплексе с нековалентным производным 19b пиримидо[4,5-*b*]азепинового каркаса (pdb 3W32) с разрешением 1.80 Å полученного рентгеноструктурным анализом [26].

Общая методика получения халконов 2–6.

К раствору 1 моль ацетофенона и 1 моль замещенного альдегида в 15 мл этанола при перемешивании добавляли 5%-ный раствор NaOH в качестве катализатора. Полученную смесь кипятили 3–5 ч и оставляли на ночь. Осадок отфильтровывали и перекристаллизовывали из этанола.

(*E*)-1-[4-(Пентилокси)фенил]-3-фенилпроп-2-ен-1-он (2). Выход 71%, т. пл. 87–88°C. ИК спектр, ν , cm^{-1} : 1657 (C=O). Спектр ЯМР ^1H , δ , м. д. (J , Гц): 0.96 т (3H, CH_3 , J 7.1), 1.35–1.53 м (4H, CH_2), 1.75–1.85 м (2H, CH_2), 4.05 т (2H, OCH_2 , J 6.5), 6.93–6.98 м (2H, C_6H_4), 7.35–7.44 м (3H, m,p - C_6H_5), 7.67 д (1H, $\text{CH}=\text{CH}$, J 15.6), 7.71 д (1H, $\text{CH}=\text{CH}$, J

15.6), 7.70–7.75 м (2H, *o*-C₆H₅), 8.02–8.07 м (2H, C₆H₄). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.5 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.5 (CH₂), 28.2 (CH₂), 67.4 (OCH₂), 113.7 (2CH), 121.6 (CH), 128.0 (2CH), 128.2 (2CH), 129.4 (CH), 130.2 (2CH), 134.7, 142.5 (CH), 162.2, 186.3 (CO). Найдено, %: С 81.36; Н 7.50. C₂₀H₂₂O₂. Вычислено, %: С 81.60; Н 7.53.

(E)-3-(4-Метоксифенил)-1-[4-(пентилокси)фенил]проп-2-ен-1-он (3). Выход 51%, т. пл. 88–89°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1652 (C=O). Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.96 т (3H, CH₃, *J* 7.1), 1.35–1.53 м (4H, CH₂), 1.75–1.85 м (2H, CH₂), 3.84 с (3H, OCH₃), 4.03 т (2H, OCH₂, *J* 6.5), 6.90–6.97 м (4H, C₆H₄), 7.55 д (1H, CH=CH, *J* 15.5), 7.64 д (1H, CH=CH, *J* 15.5), 7.64–7.69 м (2H, C₆H₄OMe), 7.99–8.04 м (2H, C₆H₄OAm). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.5 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.2 (CH₂), 54.6 (OCH₃), 67.3 (OCH₂), 113.6 (2CH), 113.8 (2CH), 119.1 (CH), 127.3, 129.7 (2CH), 130.1 (2CH), 130.5, 142.5 (CH), 160.8, 162.0, 186.3 (CO). Найдено, %: С 77.20; Н 7.48. C₂₁H₂₄O₃. Вычислено, %: С 77.75; Н 7.46.

(E)-3-(4-Бромфенил)-1-[4-(пентилокси)фенил]проп-2-ен-1-он (4). Выход 70%, т. пл. 132–133°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1658 (C=O). Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.96 т (3H, CH₃, *J* 7.1), 1.34–1.52 м (4H, CH₂), 1.75–1.85 м (2H, CH₂), 4.04 т (2H, OCH₂, *J* 6.5), 6.93–6.98 м (2H, C₆H₄OAm), 7.56–7.56 м (2H, C₆H₄Br), 7.62 д (1H, CH=CH, *J* 15.6), 7.66–7.70 м (2H, C₆H₄Br), 7.76 д (1H, CH=CH, *J* 15.6), 8.03–8.08 м (2H, C₆H₄OAm). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.5 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.5 (CH₂), 28.2 (CH₂), 67.4 (OCH₂), 113.7 (2CH), 122.3 (CH), 123.3, 129.7 (2CH), 130.1, 130.3 (2CH), 131.3 (2CH), 133.9, 141.1 (CH), 162.3, 186.2 (CO). Найдено, %: С 64.30; Н 5.60. C₂₀H₂₁BrO₂. Вычислено, %: С 64.35; Н 5.67.

(E)-3-[4-(Диметиламино)фенил]-1-[4-(пентилокси)фенил]проп-2-ен-1-он (5). Выход 41%, т. пл. 127–129°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1644 (C=O). Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.96 т (3H, CH₃, *J* 7.1), 1.35–1.53 м (4H, CH₂), 1.75–1.85 м (2H, CH₂), 3.06 с (6H, NMe₂), 4.03 т (2H, OCH₂, *J* 6.5), 6.71–6.76 м (2H, C₆H₄NMe₂), 6.91–6.96 м (2H, C₆H₄OAm), 7.43 д (1H, CH=CH, *J* 15.4), 7.54–7.59 м (2H, C₆H₄NMe₂), 7.61 д (1H, CH=CH, *J* 15.4), 7.97–8.02 м (2H, C₆H₄OAm). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.5 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.2 (CH₂), 39.8 (NMe₂), 67.3 (OCH₂), 111.8 (2CH), 113.5 (2CH), 116.4 (CH), 123.0, 129.7

(2CH), 129.9 (2CH), 130.9, 143.4 (CH), 150.9, 161.8, 186.3 (CO). Найдено, %: С 78.22; Н 8.03; N 4.10. C₂₂H₂₇NO₂. Вычислено, %: С 78.30; Н 8.06; N 4.15.

(E)-3-(Бензо[*d*][1,3]диоксол-5-ил)-1-[4-(пентилокси)фенил]проп-2-ен-1-он (6). Выход 53%, т. пл. 99–100°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1649 (C=O). Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.96 т (3H, CH₃, *J* 7.1), 1.35–1.52 м (4H, CH₂), 1.75–1.85 м (2H, CH₂), 4.03 т (2H, OCH₂, *J* 6.5), 6.05 с (2H, OCH₂O), 6.84 д (1H, C₆H₃, *J* 8.0), 6.91–6.96 м (2H, C₆H₄), 7.16 д. д (1H, C₆H₃, *J* 8.0, 1.7), 7.39 д (1H, C₆H₃, *J* 1.7), 7.58 с (2H, CH=CH), 8.02–8.07 м (2H, C₆H₄). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.5 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.2 (CH₂), 67.4 (OCH₂), 101.0 (OCH₂O), 106.4 (CH), 107.8 (CH), 113.6 (2CH), 119.6 (CH), 124.6 (CH), 129.2, 130.2 (2CH), 130.5, 142.5 (CH), 147.8, 148.9, 162.1, 186.2. Найдено, %: С 74.52; Н 6.45. C₂₁H₂₂O₄. Вычислено, %: С 74.54; Н 6.55.

Общая методика получения пиразолинов 7–11. К раствору 0.001 моль (*E*)-1-(4-пентилоксифенил)-3-(арил)проп-2-ен-1-она **2–6** и 0.001 моль фенилгидразина в 15 мл этанола при комнатной температуре добавляли 2 капли серной кислоты. Полученную смесь кипятили 5–7 ч и оставляли на ночь. Осадок отфильтровывали, промывали водой и перекристаллизовывали из этанола.

3-[4-(Пентилокси)фенил]-1,5-дифенил-4,5-дигидро-1H-пиразол (7). Выход 31%, т. пл. 105–106°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1599 (C=N). Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.96 т (3H, CH₃, *J* 7.1), 1.35–1.52 м (4H, CH₂), 1.73–1.83 м (2H, CH₂), 3.06 д. д (1H, CH₂CH, *J* 17.1, 7.0), 3.86 д. д (1H, CH₂CH, *J* 17.1, 12.2), 3.97 т (2H, OCH₂, *J* 6.5), 5.27 д. д (1H, CHCH₂, *J* 12.7, 7.0), 6.63–6.69 м (1H, *p*-C₆H₅), 6.83–6.88 м (2H, C₆H₄), 6.93–6.98 м (2H, *o*-C₆H₅), 7.04–7.11 м (2H, *m*-C₆H₅), 7.19–7.35 м (5H, C₆H₅), 7.58–7.63 м (2H, C₆H₄). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.6 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.3 (CH₂), 43.2 (CH₂CH), 63.4 (CH), 67.1 (OCH₂), 112.6 (2CH), 113.9 (2CH), 117.9 (CH), 124.6, 125.3 (2CH), 126.6 (2CH), 126.8 (CH), 128.1 (2CH), 128.4 (2CH), 142.4, 144.5, 146.1, 159.0. Найдено, %: С 81.17; Н 7.33; N 7.27. C₂₆H₂₈N₂O. Вычислено, %: С 81.21; Н 7.34; N 7.29.

5-(4-Метоксифенил)-3-[4-(пентилокси)фенил]-1-фенил-4,5-дигидро-1H-пиразол (8). Выход 62%, т. пл. 103–105°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1596 (C=N). Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.97 т (3H, CH₃, *J*

7.0), 1.35–1.53 м (4Н, CH₂), 1.73–1.83 м (2Н, CH₂), 3.02 д. д (1Н, CH₂CH, *J* 17.1, 7.0), 3.75 с (3Н, OCH₃), 3.81 д. д (1Н, CH₂CH, *J* 17.1, 12.1), 3.97 т (2Н, OCH₂, *J* 6.4), 5.22 д. д (1Н, CH, *J* 12.1, 7.0), 6.62–6.68 м (1Н, *p*-C₆H₅), 6.79–6.89 м (4Н, C₆H₄), 6.93–6.99 м (2Н, *o*-C₆H₅), 7.04–7.11 м (2Н, *m*-C₆H₅), 7.17–7.23 м (2Н, C₆H₄OMe), 7.58–7.63 м (2Н, C₆H₄OC₅H₁₁). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.6 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.3 (CH₂), 43.2 (CH₂CH), 54.4 (OCH₃), 62.9 (CH), 67.1 (OCH₂), 112.6 (2CH), 113.9 (4CH), 117.8 (CH), 124.7, 126.4 (2CH), 126.6 (2CH), 128.0 (2CH), 134.2, 144.5, 146.0, 158.2, 158.9. Найдено, %: С 78.20; Н 7.26; N 6.74. C₂₇H₃₀N₂O₂. Вычислено, %: С 78.23; Н 7.29; N 6.76.

5-(4-Бромфенил)-3-[4-(пентилокси)фенил]-1-фенил-4,5-дигидро-1*H*-пиразол (9). Выход 95%, т. пл. 114–115°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1596 (C=N). Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.95 т (3Н, CH₃, *J* 7.1), 1.34–1.52 м (4Н, CH₂), 1.72–1.82 м (2Н, CH₂), 3.02 д. д (1Н, CH₂, *J* 17.2, 7.0), 3.86 д. д (1Н, CH₂, *J* 17.2, 12.2), 3.96 т (2Н, OCH₂, *J* 6.4), 5.29 д. д (1Н, CH, *J* 12.2, 7.0), 6.64–6.70 м (1Н, *p*-C₆H₅), 6.83–6.88 м (2Н, C₆H₄OC₅H₁₁), 6.91–6.95 м (2Н, *o*-C₆H₅), 7.05–7.11 м (2Н, *m*-C₆H₅), 7.22–7.26 м (2Н, C₆H₄Br), 7.42–7.46 м (2Н, C₆H₄Br), 7.57–7.62 м (2Н, C₆H₄OC₅H₁₁). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.5 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.3 (CH₂), 43.0 (CH₂CH), 62.7 (CH), 67.1 (OCH₂), 112.6 (2CH), 113.9 (2CH), 118.1, 120.3, 124.4, 126.7 (2CH), 127.4 (2CH), 128.1 (2CH), 131.4 (2CH), 141.6, 144.3, 146.2, 159.1. Найдено, %: С 67.30; Н 5.80; N 6.03. C₂₆H₂₇BrN₂O. Вычислено, %: С 67.39; Н 5.87; N 6.05.

N,N-Диметил-4-{3-[4-(пентилокси)фенил]-1-фенил-4,5-дигидро-1*H*-пиразол-5-ил}анилин (10). Выход 95%, т. пл. 147–148°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1599 (C=N). Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.95 т (3Н, CH₃, *J* 7.1), 1.36–1.51 м (4Н, CH₂), 1.73–1.82 м (2Н, CH₂), 2.91 с (6Н, NMe₂), 3.02 д. д (1Н, CH₂CH, *J* 17.1, 7.0), 3.78 д. д (1Н, CH₂CH, *J* 17.1, 12.1), 3.96 т (2Н, OCH₂, *J* 6.5), 5.16 д. д (1Н, CHCH₂, *J* 12.1, 7.0), 6.60–6.65 м (1Н, *p*-C₆H₅), 6.64–6.70 м (2Н, C₆H₄NMe₂), 6.82–6.87 м (2Н, C₆H₄OC₅H₁₁), 6.93–6.98 м (2Н, *o*-C₆H₅), 7.02–7.08 м (2Н, *m*-C₆H₅), 7.09–7.14 м (2Н, C₆H₄NMe₂), 7.57–7.62 м (2Н, C₆H₄OC₅H₁₁). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.6 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.3 (CH₂), 40.1 (NMe₂), 43.2 (CH₂), 63.1 (CH), 67.1 (OCH₂), 112.7 (4CH), 113.8 (2CH), 117.6 (CH), 124.9,

126.1 (2CH), 126.5 (2CH), 128.0 (2CH), 144.6, 146.0, 149.1, 158.9. Найдено, %: С 78.60; Н 7.76; N 9.80. C₂₈H₃₃N₃O. Вычислено, %: С 78.65; Н 7.78; N 9.83.

5-(Бензо[*d*][1,3]диоксол-5-ил)-3-[4-(пентилокси)фенил]-1-фенил-4,5-дигидро-1*H*-пиразол (11). Выход 83%, т. пл. 118–119°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1596 (C=N). Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.96 т (3Н, CH₃, *J* 7.1), 1.35–1.52 м (4Н, CH₂), 1.73–1.83 м (2Н, CH₂), 3.03 д. д (1Н, CH₂CH, *J* 17.1, 7.0), 3.81 д. д (1Н, CH₂CH, *J* 17.1, 12.1), 3.97 т (2Н, OCH₂, *J* 6.5), 5.20 д. д (1Н, CH, *J* 12.1, 7.0), 5.93 с (2Н, OCH₂O), 6.64–6.70 м (1Н, *p*-C₆H₅), 6.74 д (1Н, C₆H₃, *J* 7.8), 6.75 д (1Н, C₆H₃, *J* 1.8), 6.80 д. д (1Н, C₆H₃, *J* 7.8, 1.8), 6.83–6.88 м (2Н, C₆H₄), 6.95–7.00 м (2Н, *o*-C₆H₅), 7.06–7.12 м (2Н, *m*-C₆H₅), 7.58–7.63 м (2Н, C₆H₄). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.6 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.3 (CH₂), 43.2 (CH₂CH), 63.2 (CH), 67.1 (OCH₂), 100.4 (OCH₂O), 105.6 (CH), 107.9 (CH), 112.6 (2CH), 113.9 (CH), 117.9 (CH), 118.5 (CH), 124.6, 126.6 (2CH), 128.1 (2CH), 136.3, 144.4, 146.1, 146.3, 147.7, 159.0. Найдено, %: С 75.65; Н 6.57; N 6.53. C₂₇H₂₈N₂O₃. Вычислено, %: С 75.68; Н 6.59; N 6.54.

Общая методика получения 2,4,6-триарилпириимидинов 12–16. Смесь 0.001 моль гидрохлорида бензамидина, 0.001 моль одного из (*E*)-1-(4-пентилоксифенил)-3-(арил)проп-2-ен-1-онов и 0.22 г (0.004 моль) КОН в 10 мл этанола кипятили 5 ч. Осадок отфильтровывали, промывали водой и перекристаллизовывали из этанола.

4-[4-(Пентилокси)фенил]-2,6-дифенилпириимидин (12). Выход 40%, т. пл. 89–90°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1606, 1589. Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.98 т (3Н, CH₃, *J* 7.0), 1.37–1.55 м (4Н, CH₂), 1.77–1.87 м (2Н, CH₂), 4.04 т (2Н, OCH₂, *J* 6.4), 6.98–7.04 м (2Н, C₆H₄), 7.45–7.58 м (6Н, Ar), 8.18 с (1Н, =CH), 8.32–8.40 м (4Н, Ar), 8.65–8.70 м (2Н, Ar). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.6 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.3 (CH₂), 67.2 (OCH₂), 108.8 (CH), 114.0 (2CH), 126.8 (2CH), 127.6 (2CH), 127.8 (2CH), 128.1 (2CH), 128.4 (2CH), 128.8, 129.8 (CH), 130.0 (CH), 136.9, 137.7, 160.9, 163.1, 163.4. Найдено, %: С 82.18; Н 6.63; N 7.08. C₂₇H₂₆N₂O. Вычислено, %: С 82.20; Н 6.64; N 7.10.

4-(4-Метоксифенил)-6-[4-(пентилокси)фенил]-2-фенилпириимидин (13). Выход 80%, т. пл. 110–112°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1606, 1588. Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.98 т (3Н, CH₃, *J* 7.0), 1.37–1.55 м (4Н,

CH₂), 1.77–1.87 м (2H, CH₂), 3.90 с (3H, OCH₃), 4.04 т (2H, OCH₂, *J* 6.4), 6.97–7.06 м (4H, C₆H₄), 7.43–7.55 м (3H, *m,p*-C₆H₅), 8.10 с (1H, =CH), 8.29–8.39 м (4H, C₆H₄), 8.62–8.68 м (2H, *o*-C₆H₅). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.5 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.3 (CH₂), 54.7 (OCH₃), 67.2 (OCH₂), 107.9 (CH), 113.5 (2CH), 113.9 (2CH), 127.6 (2CH), 127.7 (2CH), 128.29 (2CH), 128.30 (2CH), 129.0, 129.2, 129.6 (CH), 137.9, 160.7, 161.2, 162.9, 163.0, 163.1. Найдено, %: С 79.20; Н 6.60; N 6.57. C₂₈H₂₈N₂O₂. Вычислено, %: С 79.22; Н 6.65; N 6.60.

4-(4-Бромфенил)-6-[4-(пентилокси)фенил]-2-фенилпиримидин (14). Выход 40%, т. пл. 110–112°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1605, 1587. Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.98 т (3H, CH₃, *J* 7.1), 1.37–1.56 м (4H, CH₂), 1.78–1.88 м (2H, CH₂), 4.05 т (2H, OCH₂, *J* 6.4), 6.98–7.03 м (2H, C₆H₄OAm), 7.44–7.54 м (3H, *m,p*-C₆H₅), 7.65–7.70 м (2H, C₆H₄Br), 8.24 с (1H, =CH), 8.32–8.38 м (4H, C₆H₄), 8.61–8.66 м (2H, *o*-C₆H₅). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.6 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.3 (CH₂), 67.3 (OCH₂), 108.7 (CH), 114.0 (2CH), 124.3, 127.7 (2CH), 127.8 (2CH), 128.5 (2CH), 128.7 (2CH), 129.9 (CH), 131.2 (2CH), 136.0, 137.6, 161.0, 162.3, 163.2, 163.7. Найдено, %: С 68.45; Н 5.30; N 5.90. C₂₇H₂₅BrN₂O. Вычислено, %: С 68.50; Н 5.32; N 5.92.

N,N-Диметил-4-{6-[4-(пентилокси)фенил]-2-фенилпиримидин-4-ил}анилин (15). Выход 40%, т. пл. 99–100°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1608, 1566. Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.98 т (3H, CH₃, *J* 7.1), 1.37–1.55 м (4H, CH₂), 1.77–1.87 м (2H, CH₂), 4.04 т (2H, OCH₂, *J* 6.4), 3.09 с (6H, NMe₂), 6.77–6.82 м (2H, C₆H₄NMe₂), 6.97–7.02 м (2H, C₆H₄OC₅H₁₁), 7.43–7.53 м (3H, *m,p*-C₆H₅), 8.00 с (1H, =CH), 8.22–8.27 м (2H, C₆H₄NMe₂), 8.28–8.33 м (2H, C₆H₄OC₅H₁₁), 8.63–8.68 м (2H, *o*-C₆H₅). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.6 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.3 (CH₂), 67.2 (OCH₂), 107.0, 111.2 (2CH), 113.9 (2CH), 124.2 (CH), 127.5 (2CH), 127.7 (2CH), 127.9 (2CH), 128.2 (2CH), 129.3, 129.5 (CH), 138.2, 151.5, 160.6, 162.6, 162.7, 163.4. Найдено, %: С 79.58; Н 7.10; N 9.58. C₂₉H₃₁N₃O. Вычислено, %: С 79.60; Н 7.14; N 9.60.

4-(Бензо[*d*][1,3]диоксол-5-ил)-6-[4-(пентилокси)фенил]-2-фенилпиримидин (16). Выход 40%, т. пл. 105–107°C. ИК спектр, ν, см⁻¹: 1607, 1589. Спектр ЯМР ¹H, δ, м. д. (*J*, Гц): 0.98 т (3H, CH₃, *J* 7.0), 1.37–1.55 м (4H, CH₂), 1.82 уш. квинтет (2H,

CH₂, *J* 6.4), 4.04 т (2H, OCH₂, *J* 6.4), 6.09 с (2H, OCH₂O), 6.96 д (1H, C₆H₃, *J* 8.2), 6.97–7.02 м (2H, C₆H₄OC₅H₁₁), 7.43–7.54 м (3H, *m,p*-C₆H₅), 7.92–8.01 м (2H, C₆H₃), 8.10 уш. с (1H, =CH), 8.31–8.36 м (2H, C₆H₄), 8.61–8.67 м (2H, *o*-C₆H₅). Спектр ЯМР ¹³C, δ_C, м. д.: 13.6 (CH₃), 21.8 (CH₂), 27.6 (CH₂), 28.3 (CH₂), 67.2 (OCH₂), 101.0 (OCH₂O), 107.0, 107.7 (CH), 108.1 (CH), 113.9 (2CH), 121.5 (CH), 127.6 (2CH), 127.7 (2CH), 128.4 (2CH), 128.9, 129.7 (CH), 131.1, 137.8, 147.8, 149.3, 160.8, 162.8, 162.9, 163.2. Найдено, %: С 76.58; Н 5.95; N 6.37. C₂₈H₂₆N₂O₃. Вычислено, %: С 76.69; Н 5.98; N 6.39.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Исаханиян Ануш Усиковна, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1713-4908>

Овасян Заруи Арменовна, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6698-7184>

Григорян Геворг Сергеевич, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0675-735X>

Мхитарян Размик Парсамович, ORCID: <https://orcid.org/0009-0009-6277-2747>

Габриелян Лиана Сергеевна, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9212-9682>

Паносян Генрик Агавардович, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8311-6276>

Дангян Марк Юриевич, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7703-1591>

Саргсян Армен Севакович, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7249-233X>

Амбарцумян Артур Альбертович, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9526-7768>

Арутюнян Артур Арменович, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0641-5453>

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Morsy N.M., Hassan A.S. // Eur. J. Chem. 2022. Vol. 13. N 2. P. 241. doi 10.5155/eurjchem.13.2.241-252.2245
2. Suwito H., Jumina, Mustofa, Pudjiastuti P., Fanani M.Z., Kimata-Arigo Y., Katahira R., Kawakami T., Fujiwara T., Hase T., Sirat H.M., Puspaningsih N.N.T. //

- Molecules. 2014. Vol. 19. P. 21473. doi 10.3390/molecules191221473
3. Rammohan A., Reddy J.S., Sravya G., Rao C.N., Zyryanov G.V. // Environ. Chem. Lett. 2020. Vol. 18. N 2. P. 433. doi 10.1007/s10311-019-00959-w
 4. Khan S.A., Asiri A.M., Al-Ghamdi N.S.M., Asad M., Zayed M.E.M., Elroby S.A.K., Aqlan F.M., Wani M.Y., Sharma K. // J. Mol. Struct. 2019. Vol. 1190. P. 77. doi 10.1016/j.molstruc.2019.04.046
 5. Gouhar R.S., Ewies E.F., El-Shehry M.F., Shaheen M.N.E., Ibrahim E.-M.M.E. // J. Heterocycl. Chem. 2018. Vol. 55. P. 2368. doi 10.1002/jhet.3301
 6. Samshuddin S., Narayana B., Sarojini B.K., Khan M.T.H., Yathirajan H.S., Raj C.G.D., Raghavendra R. // Med. Chem. Res. 2011. Vol. 21. N 8. P. 2012. doi 10.1007/s00044-011-9735-9
 7. Гимадиева А.Р., Чернышенко Ю.Н., Мустафин А.Г., Абдрахманов И.Б. // Баш. хим. ж. 2007. Т. 14. № 3. С. 78.
 8. Lagoja I.M. // Chem. Biodivers. 2007. Vol. 2. N 1. P. 1. doi 10.1002/cbdv.200490173
 9. Мартинкевич Д.С., Чернявская Е.Ф., Тарасевич В.А. // Вестці НАН Беларусі. Сер. хим. навук. 2021. Т. 57. № 4. С. 431. doi 10.29235/1561-8331-2021-57-4-431-437
 10. Rani A., Anand A., Kumar K., Kumar V. // Exp. Opin. Drug Discov. 2019. Vol. 14. N 3. P. 249. doi 10.1080/17460441.2019.1573812
 11. Mehmood R., Sadiq A., Alsantali R.I., Mughal E.U., Alsharif M.A., Naeem N., Javid A., Al-Rooqi M.M., Chaudhry G.-S., Ahmed S.A. // ACS Omega. 2022. Vol. 7. N 4. P. 3775. doi 10.1021/acsomega.1c06694
 12. Чиряпкин А.С. // Juvenis Scientia. 2022. Т. 8. № 5. С. 16. doi 10.32415/jscientia_2022_8_5_16-30
 13. Varghese B., Al-Busafi S.N., Suliman F.O., Al-Kindy S.M.Z. // RSC Adv. 2017. Vol. 7. P. 46999. doi 10.1039/C7RA08939B
 14. Ahmed M.H., El-Hashash M.A., Marzouk M.I., El-Naggar A.M. // J. Heterocycl. Chem. 2019. Vol. 56. P. 114. doi 10.1002/jhet.3380
 15. Patil S.B. // Int. J Pharm. Sci. Res. 2018. Vol. 9. N 1. P. 44. doi 10.13040/IJPSR.0975-8232.9(1).44-52
 16. Zhang B., Guo T., Li Z., Kühn F.E., Lei M., Zhao Z.K., Xiao J., Zhang J., Xu D., Zhang T., Li C. // Nat. Commun. 2022. Vol. 13. Art. no. 3365. doi 10.1038/s41467-022-30815-5
 17. Achelle S., Rodriguez-Lopez J., Larbani M., Plaza-Pedroche R., Robin-le Guen F. // Molecules. 2019. Vol. 24. P. 1742. doi 10.3390/molecules24091742
 18. Агарков А.С., Кожихов А.А., Неведов А.А., Овсянников А.С., Исламов Д.Р., Соловьева С.Е., Антипин И.С. // Докл. РАН. Науки о материалах. 2022. Т. 505. С. 50. doi 10.31857/S2686953522700078; Agarkov A.S., Kozhikhov A.A., Nefedov A.A., Ovsyannikov A.S., Islamov D.R., Solovyova S.E., Antipin I.S. // Doklady Chem. 2022. Vol. 505. P. 177. doi 10.1134/S0012500822700070
 19. Арутюнян А.А., Сумбатян А.С., Амбарцумян А.А., Паносян Г.А., Григорян А.С., Степанян Г.М., Мурадян Р.Е. // ЖОрХ. 2023. Т. 59. № 9. С. 1179. doi 10.31857/S0514749223090082; Harutyunyan A.A., Sumbatyan A.S., Ambartsumyan A.A., Panosyan G.A., Grigoryan A.S., Stepanyan G.M., Muradyan R.E. // Russ. J. Org. Chem. 2023. Vol. 59. N 9. P. 1511. doi 10.1134/S1070428023090087
 20. Lakowicz J.R. Principles of Fluorescence Spectroscopy. New York: Springer, 2006. P. 954. doi 10.1007/978-0-387-46312-4
 21. Brouwer A.M. // Pure Appl. Chem. 2011. Vol. 83. N 12. P. 2213. doi 10.1351/PAC-REP-10-09-31
 22. Hambarzumyan A.A., Hovsepian A.S., Hayrapetyan H.L., Chailyan S.G. // Int. J. Pept. Res. Ther. 2021. Vol. 27. P. 1597. doi 10.1007/s10989-021-10194-z
 23. Trott O., Olson A.J. // J. Comput. Chem. 2010. Vol. 31. P. 455. doi 10.1002/jcc.21334
 24. Gao Y., Yan L., Huang Y., Liu F., Zhao Y., Cao L., Wang T., Sun Q., Ming Z., Zhang L., Ge J., Zheng L., Zhang Y., Wang H., Zhu Y., Zhu C., Hu T., Hua T., Zhang B., Yang X., Li J., Yang H., Liu Z., Xu W., Guddat L.W., Wang Q., Lou Zh., Rao Z. // Science. 2020. Vol. 368. N 6492. P. 779. doi 10.1126/science.abb7498
 25. Kirsch K., Zeke A., Töke O., Sok P., Sethi A., Sebő A., Kumar G.S., Egri P., Póti Á.L., Gooley P., Peti W., Bento I., Alexa A., Reményi A. // Nat. Commun. 2020. Vol. 11. Art. no. 5769. doi 10.1038/s41467-020-19582-3
 26. Kawakita Y., Seto M., Ohashi T., Tamura T., Yusa T., Miki H., Iwata H., Kamiguchi H., Tanaka T., Sogabe S., Ohta Y., Ishikawa T. // Bioorg. Med. Chem. 2013. Vol. 21. P. 2250. doi 10.1016/j.bmc.2013.02.014

Pyrazolines and Pyrimidines Based on (*E*)-1-(4-Pentyloxyphenyl)-3-arylprop-2-en-1-ones. Synthesis, Docking Study and Luminescent Properties

A. U. Isakhanyan^{1,*}, Z. A. Ovasyan¹, G. S. Grigoryan², R. P. Mkhitarian²,
L. S. Gabrielyan², G. A. Panosyan¹, M. Yu. Dangyan¹, A. S. Sargsyan³,
A. A. Hambardzumyan³, and A. A. Harutyunyan¹

¹ *Scientific and Technological Center of Organic and Pharmaceutical Chemistry
of the National Academy of Sciences of the Republic of Armenia, Yerevan, 0014 Armenia*

² *Yerevan State University, Yerevan, 0025 Armenia*

³ *Scientific and Production Center "Armbiotechnology" of the National Academy of Sciences of the Republic of Armenia,
Yerevan, 0056 Armenia*

**e-mail: anush.isakhanyan.51@mail.ru*

Received June 6, 2024; revised August 19, 2024; accepted August 21, 2024

(*E*)-1-(4-Pentyloxyphenyl)-3-(aryl)prop-2-en-1-ones were obtained by condensation of 1-(4-pentyloxyphenyl) ethanone with aromatic aldehydes in an aqueous ethanol solution in the presence of NaOH. The corresponding pyrazoline derivatives were prepared by cyclization of substituted chalcones with phenylhydrazine in an acidic medium, while 2,4,6-triaryl-substituted pyrimidines were produced in the case of benzamidine hydrochloride in the KOH–ethanol. It was found that all synthesized pyrazoline derivatives exhibit pronounced luminescent properties. A docking study of the compounds was carried out against four types of receptors.

Keywords: 1-(4-pentyloxyphenyl)ethanone, (*E*)-1-(4-pentyloxyphenyl)-3-(aryl)prop-2-en-1-ones, cyclocondensation, pyrazolines, pyrimidines, luminescence