



CHEMISTRY AND CHEMICAL TECHNOLOGY 2025

Student Scientific Conference



May 9, 2025
NFTMC, Saulėtekio al. 3,
Vilnius



Klaipėdos
universitetas



CENTER
FOR PHYSICAL SCIENCES
AND TECHNOLOGY



Chemistry and Chemical Technology 2025

Student Scientific Conference

Scientific committee

Doc. dr. Lina Mikoliūnaitė | VU (chairwoman)

Prof. dr. Aldona Beganskienė | VU

Doc. dr. Živilė Stankevičiūtė | VU

Doc. dr. Inga Grigoravičiūtė | VU

Doc. dr. Vaida Kitrytė-Syrpa | KTU

Prof. dr. Vytautas Getautis | KTU

Prof. dr. Saulius Grigalevičius | KTU

Doc. dr. Vilija Kederienė | KTU

Dr. Tadas Prasauskas | KTU

Dr. Žilvinas Kryževičius | KU

Prof. dr. Audronė Žukauskaitė | KU

Organizing committee

Dr. Lina Mikoliūnaitė | VU (chairwoman)

Dr. Greta Inkrataitė (secretary) | VU

Dr. Živilė Stankevičiūtė | VU

Dr. Inga Grigoravičiūtė | VU

Dr. Julija Grigorjevaitė | VU

Dr. Indrė Misiūnaitė-Vaškevičienė | VU

Dr. Anton Popov | VU

Dr. Agnė Kizalaitė | VU

PhD stud. Eglė Ežerskytė | VU

PhD stud. Gytautė Sirgėdaitė | VU

PhD stud. Justinas Januškevičius | VU

Copyright © 2025 Justinas Januškevičius, Lina Mikoliūnaitė, Živilė Stankevičiūtė. Published by Vilnius University Press.

This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Licence, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

ISSN 2538-7332 (digital), DOI <https://doi.org/10.15388/CCT.2025>



PENKTOJE PADĖTYJE CIKLINIAIS AMINAIŠ IR AMIDAIŠ MODIFIKUOTŲ 1-CHLOR-2,4-DIMETOKSIBENZENŲ SINTEZĖ

Ugnius Popovas*, Ieva Žutautė

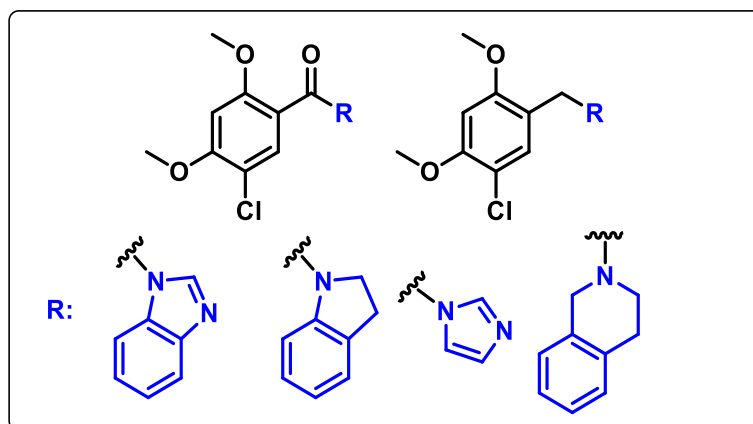
Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakulteto Chemijos institutas, Lietuva

[*ugnius.popovas@chgf.stud.vu.lt](mailto:ugnius.popovas@chgf.stud.vu.lt)

Hsp90 (angl. Heat Shock Protein) yra vienas pagrindinių molekulinų šaperonų, atsakingas už daugiau nei 300 klientinių baltymų brendimo procesų reguliavimą. Daugelis šių baltymų yra susiję su sunkiai gydomomis ligomis, tokiomis kaip vėžys, neurodegeneraciniai bei infekciniai susirgimai. Dėl to Hsp90 laikomas svarbiu taikiniu ieškant naujų sintetinių baltymo slopiklių. Vienas iš pagrindinių jo farmakoforų yra rezorcinolio fragmentas. Jo hidroksigrupės formuoja vandenilinius ryšius su Hsp90 N-terminalio domeno aminorūgštimis, o tai lemia baltymo slopinimą. Dėl šios savybės rezorcinolio fragmentą turintys junginiai plačiai taikomi kuriant pažangesnius antros kartos Hsp90 slopiklius [1].

Norint sukurti naujas struktūras, pasižyminčias geresnėmis baltymo slopinimo savybėmis, buvo nuspręsta susintetinti junginius, kurių sudėtyje yra rezorcinolio fragmentą turintys amidai ir aminorūgštys. Bazinė molekule pasirinktas 4-chlorrezorcinolis.

Pirmiausia į šio junginio šeštąją padėtį buvo įvesta aldehido grupė. Antrajame etape, atsižvelgiant į planuojamus tolimesnius sintezės žingsnius, 4-chlorrezorcinolio hidroksigrupės buvo apsaugotos naudojant metiljodidą. Trečiajame etape sintezė išsišakoja: vienu keliu aldehido grupė oksiduota iki karboksirūgšties naudojant kalio permanganatą, o vėliau ši rūgštis kondensuota su pasirinktais aminorūgštimis, taip gaunami amidai. Kita sintezės kryptis – aldehido redukcija iki pirminio alkoholio, kuris vėliau, dviejų pakopų reakcijoje, pirmiausia brominamas fosforo tribromidu, po to vykdomas nukleofilinis pakeitimas tiksliniais aminorūgštimis.



1 schema. Tikslinių sintetintų junginių, turinčių 1-chlor-2,4-dimetoksibenzeno fragmentą, struktūros.

Literatūros sąrašas:

1. Li, L., Wang, L., You, Q., & Xu, X. // Heat Shock Protein 90 Inhibitors: An Update on Achievements, Challenges, and Future Directions. (2019). *J. Med. Chem.*, **63**(5), 1798–1822.