**1,3-Дироданоацетон и продукты его циклизации: Синтез и молекулярный докинг**

***Киндоп В.К.***

*Аспирант*

*Кубанский государственный университет*

*Факультет химии и высоких технологий, Краснодар, Россия*

*E–mail: Slavakindop@mail.ru*

Основная цель данного исследования состояла в синтезе симметричного 1,3-дироданоацетона (дитиоцианатоацетона), изучении его химических свойств и спектра возможной биологической активности *in silico*. Дироданоацетон, благодаря наличию ряда активных реакционных центров, представляет собой молекулу с широкими возможностями для трансформации. Продукты циклизации представляют интерес как молекулярные платформы для получения биоактивных соединений гетероциклического ряда.

Синтез осуществляли в ацетоне, исходя из доступного 1,3-дихлорацетона **1**, на который действовали избытком роданида калия в среде органического растворителя [1].



Мягким гидролизом дироданоацетона **2** в присутствии кислоты в водной среде было получено ранее не описанное производное 2-оксотиазолина **4**.



Строение соединения **4** подтверждено комплексом спектральных данных, а также РСА.



Рисунок 1. Молекулярная структура соединения **4** (данные РСА).

Нами был проведен предикторный анализ и расчет *in silico* возможных протеиновых мишеней для полученных соединений. Докинг проводили с использованием протокола GalaxySagittarius.



Рисунок 2. Прогнозируемая структура протеин-лигандного комплекса соединения **2** и бромдомен-содержащего протеина 9 BRD9

**Литература**

1. Пономарев Ф.Г. Синтез симметричных диродан- и хлорроданацетона // Труды Воронежского гос. ун-та. 1937., Т. 9., Вып. 3., С. 167-171.