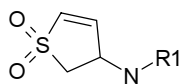




## 3-Ариламино-2,3-дигідротієно-1,1-діоксиди (3-7)



№ сполуки	R1	T <sub>пл</sub> , °C	Вихід, %	Сигнали в спектрах <sup>1</sup> H ЯМР, δ м.ч., J=Гц	Брутто-формула	Знай-дено		Обчис-лено	
						N	S	N	S
3		131	78,9	2,87...2,97 (м., 1H, H-2), 3,80...3,90 (м., 1H, H-2'), 4,92...5,00 (м., 1H, NH), 6,15...6,25 (м., 1H, H-3), 6,60...6,72 (м., 3H, Ar), 6,88...6,94 (м., 1H, H-4), 7,07...7,16 (м., 2H, Ar) 7,16...7,30 (м., 1H, H-5)	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub> S	6,5	15,0	6,7	15,3
4		116	82,3	2,92...3,00 (м., 1H, H-2), 3,69...3,78 (м., 1H, H-2'), 4,85...4,97 (м., 1H, NH), 5,75...5,90 (м., 1H, H-3), 6,56 (д., 2H, J=8,3 Hz, Ar), 6,80...6,87 (м., 1H, H-4), 6,90 (д., 2H, J=8,3 Hz, Ar), 6,95...7,25 (м., 1H, H-5)	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub> S	6,5	14,3	6,3	14,4
5		168	89,6	2,07 (с., 3H, CH <sub>3</sub> ), 2,12 (с., 3H, CH <sub>3</sub> ), 2,85...2,95 (м., 1H, H-2), 3,80...3,90 (м., 1H, H-2'), 4,87...4,98 (м., 1H, NH), 5,85...5,95 (м., 1H, H-3), 6,40...6,47 (м., 1H, Ar), 6,55 (с., 1H, Ar), 6,83...6,95 (м., 2H, 1HAr+ H-4), 7,15...7,23 (м., 1H, H-5)	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub> S	5,6	13,9	5,9	13,5
6		120	94,7	1,21 (с., 9H, 3CH <sub>3</sub> ), 2,87...2,97 (м., 1H, H-2), 3,78...3,90 (м., 1H, H-2'), 4,88...5,00 (м., 1H, NH), 5,95...6,12 (м., 1H, H-3), 6,63 (д., 2H, J=8,8 Ar), 6,88...6,94 (м., 1H, H-4), 7,13 (д., 2H, J=8,8 Ar), 7,17...7,23 (м., 1H, H-5)	C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>2</sub> S	5,3	12,1	5,3	12,0
7		132	81,3	2,90...2,97 (м., 1H, H-2), 3,82...3,90 (м., 1H, H-2'), 4,92...5,00 (м., 1H, NH), 6,40...6,70 (м., 1H, H-3), 6,66 (д., 2H, J=8,8 Ar), 6,88...6,95 (м., 1H, H-4), 7,20...7,25 (м., 1H, H-5) 7,26 (д., 2H, J=8,8 Ar)	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> BrNO <sub>2</sub> S	5,0	11,0	4,9	11,1

взаємодією **8** з низькоосновними та орто-заміщеними анілінами було виділено тільки лінійні продукти **13-16** (схема 2) (табл. 3).

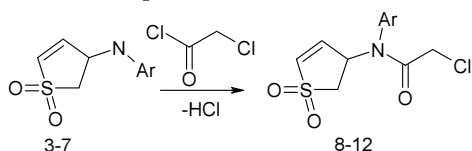
Отримані дані дають підстави стверджувати, що утворення сполук **28-38** проходить у дві стадії: першою є моноалкілування 2-хлорацетамідами **8-12** амінів з утворенням відповідних лінійних N1-(1,1-діоксидо-2,3-дигідро-3-тієніл)-N2-R-N1-арилгліцинамідів **17-27**,

другою — внутрішньомолекулярне нуклеофільне приєднання вторинної аміногрупи до подвійного зв'язку тіолендіоксидного кільця з утворенням 1-арилгексагідротієно[3,4-*b*]піперазин-2(1*H*)-он-6,6-діоксидів **28-38**.

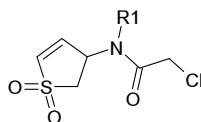
Цис-з'єднання тетрагідротієно-1,1-діоксидного та кетопіперазинового кілець у сполуках **28-38** припущено на основі даних про реакції внутрішньомолекулярної циклізації похідних тіолен-1,1-діоксиду [10, 13].

**Висновки.** Отже, нами запропоновано зручний спосіб синтезу 4-заміщених 1-арилгексагідротієно-[3,4-*b*]піперазин-2(1*H*)-он-6,6-діоксидів. Синтезовано ряд не описаних раніше речовин. З допомогою комп'ютерної програми PASS зроблено прогноз біологічної активності сполук **28-38**, згідно з яким синтезовані речови-

Схема 1  
Взаємодія хлорацетилхлориду з 3-ариламіно-2,3-дигідротієно-1,1-діоксидами



Ацетамід 2-хлор-N-(2,3-дигідро-1,1-діоксидо-3-тієніл)-N-арил 8-12

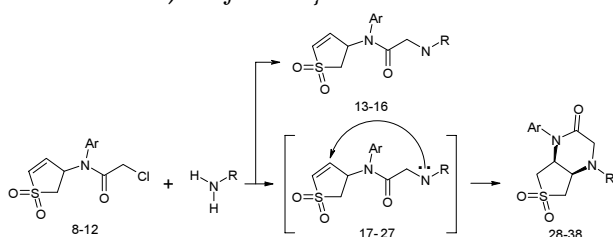


№ сполуки	R1	T <sub>пл</sub> , °C	Вихід, %	Сигнали в спектрах <sup>1</sup> H ЯМР, δ м.ч., J=Гц	Брутто-формула	Знай-дено		Обчис-лено	
						N	S	N	S
8		132	95,2	3,23...3,29 (м., 1H, H-2), 3,73...3,80 (м., 1H, H-2'), 3,92 (с., 2H, -C(O)CH <sub>2</sub> -), 5,84...5,97 (м., 1H, H-3), 6,90...6,97 (м., 1H, H-4), 7,05...7,12 (м., 1H, H-5), 7,40...7,55 (м., 5H, Ar)	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> ClNO <sub>3</sub> S	5,0	11,1	4,9	11,2
9		115	92,3	2,33 (с., 3H, CH <sub>3</sub> ), 3,22...3,50 (м., 1H, H-2), 3,70...3,80 (м., 1H, H-2'), 3,90 (с., 2H, -C(O)CH <sub>2</sub> -), 5,85...5,95 (м., 1H, H-3), 6,85...6,95 (м., 1H, H-4), 7,00...7,09 (м., 1H, H-5), 7,20...7,35 (м., 4H, Ar)	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> ClNO <sub>3</sub> S	4,6	10,9	4,7	10,7
10		130	96,8	2,22 (с., 6H, 2CH <sub>3</sub> ), 3,23...3,30 (м., 1H, H-2), 3,70...3,80 (м., 1H, H-2'), 3,92 (с., 2H, -C(O)CH <sub>2</sub> -), 5,85...5,95 (м., 1H, H-3), 6,82...6,92 (м., 1H, H-4), 7,03...7,08 (м., 1H, H-5), 7,12...7,21 (м., 3H, Ar)	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> ClNO <sub>3</sub> S	4,8	10,0	4,5	10,2
11		105	94,7	1,31 (с., 9H, 3CH <sub>3</sub> ), 3,18...3,27 (м., 1H, H-2), 3,65...3,75 (м., 1H, H-2'), 3,88 (с., 2H, -C(O)CH <sub>2</sub> -), 5,80...5,90 (м., 1H, H-3), 6,87...6,95 (м., 1H, H-4), 7,00...7,05 (м., 1H, H-5), 7,32 (д., 2H, J=8,3 Ar), 7,48 (д., 2H, J=8,3 Ar)	C <sub>16</sub> H <sub>20</sub> ClNO <sub>3</sub> S	3,9	9,3	4,1	9,4
12		180	94,3	3,23...3,65 (м., 1H, H-2), 3,65...3,75 (м., 1H, H-2'), 3,89 (с., 2H, -C(O)CH <sub>2</sub> -), 5,80...5,95 (м., 1H, H-3), 6,80...6,95 (м., 2H, H-4+ H-5), 7,40 (д., 2H, J=8,7 Ar), 7,62 (д., 2H, J=8,7 Ar)	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> BrClNO <sub>3</sub> S	3,8	8,6	3,9	8,8

ни є потенційними серцево-судинними стимуляторами та рчовинами, що підвищують рівень HDL-холестерину в крові з вірогідністю вище 60 % (табл. 5).

**Експериментальна частина. Спектри ПМР**

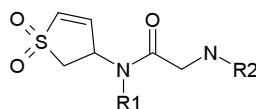
Схема 2  
Взаємодія 2-хлор-N-(1,1-діоксидо-2,3-дигідро-3-тієніл)-N-фенілацетамідів з амінами



записані приладом «Varian VXR 400» з робочою частотою 400 Гц, розчинник — DMSO-D<sub>6</sub>, стандарт — ТМС, величини хімічних зміщень вимірювались із точністю до 0,01 м.ч.

3-Ариламіно-2,3-дигідротієно-1,1-діоксиди 3-7 синтезували за методикою [12] шляхом нагрівання протягом декількох годин 3,4-дибромтетрагідротієно-1,1-діоксиду з відповідними анілінами в ізопропанолі.

**Загальний метод синтезу хлорацетамідів 3-ариламіно-2,3-дигідротієно-1,1-діоксидів 8-12.** До 0,1 моля відповідного N-(1,1-діоксидо-2,3-дигідро-3-тієніл)-N-феніламіну 3-7 у 100 мл толуолу при перемішуванні додавали 0,11 моля хлорацетилхлориду. Реакційну суміш нагрівали зі зворотним холодильником до

N1-(1,1-діоксидо-2,3-дигідро-3-тієніл)-N2-R2-N1-фенілгліцинамід **13-16**

№ сполуки	R1	R2	T <sub>пл</sub> , °C	Вихід, %	Сигнали в спектрах <sup>1</sup> H ЯМР, δ м.ч., J=Гц	Брутто-формула	Знай-дено		Обчис-лено	
							N	S	N	S
13			153	59,6	3,27...3,34 (м., 1H, H-2), 3,50 (с., 2H, C(O)CH <sub>2</sub> ), 3,74...3,83 (м., 1H, H-2), 5,94...6,01 (м., 1H, H-3), 6,32...7,13 (м., 6H, 4Ar+1H-4+1H-5), 7,4...7,7 (м., 5H, Ar)	C <sub>18</sub> H <sub>16</sub> FN <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	6,4	7,4	6,3	7,3
14			176	50,2	3,26...3,33 (м., 1H, H-2), 3,43 (с., 2H, C(O)CH <sub>2</sub> ), 3,74...3,84 (м., 1H, H-2), 5,93...6,00 (м., 1H, H-3), 6,00 (д., J=8,3 Hz, 1H, Ar), 6,75 (д., J=8, 3 Hz, 1H, Ar), 6,80 (с., 1H, Ar) 6,93...7,01 (м., 1H, H-4), 7,06...7,11 (м., 1H, H-5), 7,46...7,57 (м., 5H, Ar)	C <sub>20</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	7,5	8,7	7,6	8,7
15			239	78,6	3,28...3,39 (м., 1H, H-2), 3,63 (с., 2H, C(O)CH <sub>2</sub> ), 3,75...3,87 (м., 1H, H-2), 5,96...6,06 (м., 1H, H-3), 6,13...6,40 (м., 1H, Ar), 6,94...8,10 (м., 13H, 11Ar+1H-4+1H-5)	C <sub>22</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	7,3	8,3	7,1	8,2
16			188	63,8	2,10 (с., 3H, CH <sub>3</sub> ), 2,40 (с., 3H, CH <sub>3</sub> ), 3,21...3,29 (м., 1H, H-2), 3,46 (с., 2H, C(O)CH <sub>2</sub> ), 3,70...3,79 (м., 1H, H-2), 5,93...6,02 (м., 1H, H-3), 6,08 (д., J=7, 3 Hz, 1H, Ar), 6,51 (т., J=7, 3 Hz, 1H, Ar), 6,89...6,93 (м., 1H, H-4), 6,93...6,98 (м., 2H), 6,99...7,04 (м., 1H, H-5), 7,29...7,39 (м., 4H)	C <sub>20</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	7,5	8,5	7,6	8,7

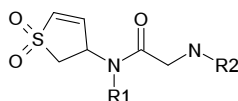
припинення виділення HCl. Після закінчення реакції вміст колби охолоджували, толуол відганяли, твердий залишок промивали ізопропанолом, відфільтровували та висушували.

**Загальний метод синтезу тієно[3,4-*b*]піперазин-2(1H)-он, 4-алкіл(бензил,фенетил)гексагідро-1-арил 6,6-діоксидів 28-35.** До 0,01 моля відповідного 2-хлор-N-(1,1-діоксидо-2,3-дигідро-3-тієніл)-N-фенілацетаміду **8-10, 12** в 5 мл ДМФА додавали 0,02 моль відповідного первинного аміну. Цю суміш при перемішуванні нагрівали за температури 120-130 °C упродовж двох годин, після чого охолоджували до 80 °C та додавали 15 мл ізопропанолу. Осад відфільтровували, промивали ізо-

пропанолом, водою, ізопропанолом та висушували.

**Загальний метод синтезу тієно[3,4-*b*]піперазин-2(1H)-он, 4-арил гексагідро-1-арил 6,6-діоксидів 36-38.** До 0,01 моля відповідного 2-хлор-N-(1,1-діоксидо-2,3-дигідро-3-тієніл)-N-фенілацетаміду **8, 9** у 5 мл ДМФА додавали 0,02 моль відповідного первинного аміну. Цю суміш при перемішуванні нагрівали за температури 150 °C протягом трьох годин. Після охолодження до 80 °C додавали 15 мл ізопропанолу. Кристали продуктів **36-38** відфільтровували, промивали ізопропанолом, водою, ізопропанолом та висушували на повітрі.

Надійшла до редакції 27.11.2006 р.

1-*R*, 4-*R'*-гексагідротієно[3,4-*b*]піперазин-2(1*H*)-он-6,6-діоксиди

№ сполуки	R1	R2	T <sub>пл</sub> , °C	Вихід, %	Сигнали в спектрах <sup>1</sup> H ЯМР, δ м.ч., J=Гц	Брутто-формула	Знайдено		Обчислено	
							N	S	N	S
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
28			166	54,9	0,91 (м., 6H, 2CH <sub>2</sub> ), 1,82...1,87 (м., 1H), 2,18...2,36 (м., 2H), 3,00...3,08 (м., 1H), 3,2...3,43 (м., 2H), 3,25 (д., 1H, J=17,1 -C(O)CH <sub>2</sub> -), 3,48 (д., 1H, J=17,11 -C(O)CH <sub>2</sub> -), 3,68...3,75 (м., 1H), 4,09 (м., 1H, H-4a), 4,80 (м., 1H, H-7a), 7,27...7,50 (м., 5H, Ar)	C <sub>16</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	8,8	10,1	8,7	9,9
29			226	59,7	1,30...2,00 (м., 8H), 2,70...2,88 (м., 2H), 3,21...3,42 (м., 2H), 3,44 (с., 2H, -C(O)CH <sub>2</sub> -), 3,66...3,75 (м., 1H), 4,34...4,44 (м., 1H, H-4a), 4,82...4,88 (м., 1H, H-7a), 7,27...7,50 (м., 5H, Ar)	C <sub>17</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	8,6	9,5	8,4	9,6
30			163	75,6	2,78...2,86 (м., 2H), 2,99...3,09 (м., 3H), 3,18...3,26 (м., 1H), 3,38...3,44 (м., 1H), 3,46 (д., 1H, J=17,09-C(O)CH <sub>2</sub> -), 3,54 (д., 1H, J=17,09-C(O)CH <sub>2</sub> -), 3,71...3,78 (м., 1H), 4,21...4,26 (м., 1H, H-4a), 4,77...4,83 (м., 1H-7a), 6,92...7,48 (м., 8H 3tiofene + 5Ar)	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S <sub>2</sub>	7,4	16,7	7,4	17,0
31			170	73,6	2,8 (с., 4H), 3,00...3,30 (м., 2H), 3,30...3,60 (м., 3H), 3,65...3,80 (м., 1H), 4,15...4,30 (м., 1H, H-4a), 4,75...4,90 (м., 1H, H-7a), 7,15...7,60 (м., 9H, Ar)	C <sub>20</sub> H <sub>21</sub> BrN <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	6,5	7,0	6,2	7,1
32			153	59,8	3,20...3,60 (м., 5H), 3,70...3,95 (м., 4H), 4,70...4,85 (м., 1H, H-7a), 6,35-6,50 (м., 2H), 7,20-7,30 (м., 2H), 7,50-7,60 (м., 3H)	C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> BrN <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S	6,8	7,4	6,6	7,5
33			198	67,7	3,16...3,30 (м., 3H), 3,39...3,54 (м., 3H), 3,93...4,05 (м., 3H), 4,75...4,81 (м., 1H, H-7a), 7,25...7,35 (м., 3H), 7,40...7,50 (м., 3H), 7,8...7,85 (д., 1H, J=8,3), 8,50...8,55 (д., 1H, J=8,3), 8,61 (с., 1H)	C <sub>18</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S	12,0	9,1	11,8	9,0
34			201	72,1	2,35 (с., 3H, CH <sub>3</sub> ), 3,10...3,19 (м., 3H), 3,33...3,42 (м., 2H), 3,45...3,50 (м., 1H), 3,85...3,93 (м., 2H, CH <sub>2</sub> ), 4,01 (м., 1H, H-4a), 4,74 (м., 1H, H-7a), 7,10...7,20 (м., 4H), 7,20...7,25 (м., 2H), 7,40...7,50 (м., 2H)	C <sub>20</sub> H <sub>21</sub> FN <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	7,5	8,2	7,2	8,2

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
35			204	74,8	2,25 (с., 6H, 2CH <sub>3</sub> ), 3,10...3,27 (м., 3H), 3,30...3,50 (м., 3H), 3,87...3,93 (м., 2H, CH <sub>2</sub> ), 4,01 (м., 1H, H-4a), 4,72 (м., 1H, H-7a), 6,97 (д., 1H, J=8,3, H-5), 7,04 (с., 1H, H-2), 7,17 (д., 1H, J=8,3), 7,39 (д., 2H, J=8,3), 7,43 (д., 2H, J=8,3)	C <sub>21</sub> H <sub>23</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	6,9	7,7	6,7	7,6
36			216	83,2	2,98...3,08 (м., 1H), 3,35...3,61 (м., 3H), 4,01 (д., 1H, J=17,6), 4,23 (д., 1H, J=17,6), 5,01...5,08 (м., 1H, H-4a), 5,33...5,42 (м., 1H, H-7a), 6,87...7,52 (м., 10H)	C <sub>18</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	8,3	9,6	8,2	9,4
37			210	79,5	2,23 (с., 3H, CH <sub>3</sub> ), 3,01...3,09 (м., 1H), 3,3...3,56 (м., 3H), 3,96 (д., 1H, J=17,6), 4,13 (д., 1H, J=17,6), 5,02 (м., 1H, H-4a), 5,28 (м., 1H, H-7a), 6,99 (д., 2H, J=8,3), 7,19 (д., 2H, J=8,3), 7,32...7,41 (м., 3H), 7,43...7,51 (м., 2H)	C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	8,0	9,3	7,8	9,0
38			211	76,3	1,25 (с., 6H, 2CH <sub>3</sub> ), 2,34 (с., 3H, CH <sub>3</sub> ), 3,16...3,24 (м., 1H), 3,28...3,56 (м., 3H), 3,92 (д., 1H, J=17,1), 4,02 (д., 1H, J=17,1), 4,45...4,60 (м., 1H), 4,96 (м., 1H, H-4a), 5,24 (м., 1H, H-7a), 6,89 (д., 2H, J=8,8), 7,06 (д., 2H, J=8,8), 7,23 (д., 2H, J=8,3), 7,27 (д., 2H, J=8,3)	C <sub>22</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S	6,5	7,7	6,8	7,7

Таблиця 5

## Комп'ютерне прогнозування біологічної активності синтезованих сполук 28-38

Вид біологічної активності	Сполука, Pa, Pi – імовірності присутності чи відсутності фармакологічного ефекту										
	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38
Здатність підвищувати рівень HDL-холестерину	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa
	0,644	0,600	0,594	0,689	0,648	0,642	0,712	0,710	0,643	0,644	0,555
	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi
	0,026	0,037	0,039	0,016	0,025	0,026	0,013	0,013	0,026	0,026	0,056
Серцево-судинний аналептик	Pa	Pa	Pa	Pa	-	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa
	0,665	0,703	0,583	0,610	-	0,704	0,522	0,519	0,721	0,68	0,597
	Pi	Pi	Pi	Pi	-	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi
	0,044	0,025	0,087	0,073	-	0,024	0,116	0,118	0,019	0,037	0,080
Конвульсант	Pa	Pa	-	-	-	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa	Pa
	0,587	0,758	-	-	-	0,627	0,612	0,565	0,820	0,801	0,706
	Pi	Pi	-	-	-	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi	Pi
	0,067	0,022	-	-	-	0,054	0,058	0,075	0,011	0,014	0,033
Антиаритмічна активність	-	-	-	Pa	-	-	-	-	Pa	Pa	Pa
	-	-	-	0,516	-	-	-	-	0,699	0,640	0,552
	-	-	-	Pi	-	-	-	-	Pi	Pi	Pi
	-	-	0,137	-	-	-	-	0,064	0,080	0,119	
Фібринолітик	-	-	-	-	Pa	Pa	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	0,557	0,583	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	Pi	Pi	-	-	-	-	-
	-	-	-	0,142	0,111	-	-	-	-	-	
Стимулятор вивільнення ацетилхоліну	-	-	-	-	Pa	-	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	0,521	-	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	Pi	-	-	-	-	-	-
	-	-	-	0,039	-	-	-	-	-	-	
Спазмолітик, сечовий	-	-	Pa	-	-	-	-	-	-	-	-
	-	-	0,559	-	-	-	-	-	-	-	-
	-	-	Pi	-	-	-	-	-	-	-	-
	-	0,037	-	-	-	-	-	-	-	-	
Антагоніст рецептора GABA A	-	Pa	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	-	0,61	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	-	Pi	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	-	0,031	-	-	-	-	-	-	-	-	
Лікування психосексуальних розладів	Pa	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	0,507	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	Pi	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	0,119	-	-	-	-	-	-	-	-	-	

Synthesis of 4-substituted 1-arylhexahydrothieno[3,4-b]pyrazin-2(1H)-one 6,6-dioxides

P.V. Shaitanov, Yu.V. Bezugly, V.M. Sapelkin, S.M. Yarmoluk

Institute of Molecular Biology and Genetics, NAS of Ukraine  
150 Zabolotny Str., Kyiv, 03143, Ukraine

**Summary.** An effective method of synthesis of 4-substituted 1-arylhexahydrothieno[3,4-b]pyrazin-2(1H)-one 6,6-dioxides on the basis of 3-arylamino-2,3-dihydrothieno 1,1-dioxides is proposed. The biological activity of new bicyclic sulfones has been predicted using PASS software.

**Keywords:** 2-ketopiperazine, thiolene, 3-arylamino-2,3-dihydrothieno 1,1-dioxide, chloracetamide 3-arylamino 2,3-dihydrothieno 1,1-dioxide, hexahydrothieno[3,4-b]pyrazin-2(1H)-one 6,6-dioxides, PASS-prognosis, intramolecular cyclization.

Перелік літератури

1. *Машковский М.Д.* Лекарственные средства: В 2 т. — М.: ООО «Издательство «Новая Волна», 2000.
2. *Рубцов М.В., Байчиков А.Г.* Синтетические химико-фармацевтические препараты (справочник). — М.: Медицина, 1971. — 328 с.
3. *Жоллиф Л., Муррей У., Пулито В., Рейц А. и др.* Арилзамещенные пиперазины для лечения доброкачественной гиперплазии простаты // ЕА1904 — 2001-10-22.
4. *Пархоменко П.И., Макаренко А.Г., Мусиенко О.А., Пархоменко В.И., Криль Л.М., Курильчик С.Н.* Синтез гетероциклических азотпроизводных тиолан- и тиолан-1,1-диоксидов, изучение превращений и биологической активности // Материалы Первой Международной конференции «Химия и биологическая активность гетероциклов и алкалоидов». — Москва, 2001. — № 1. — С. 471-478.
5. *Walter Nudenberg, West Caldwell N.Y., Edvard L., Hagen, Woodbury, Conn.; Julian R. Little Hendersonville N.C.; Chung-Ling Mao, Sandy Hook, Conn.* 1,2,3,4,4a, 5,7,7a-Octahydrothieno[3,4-b]-pyrazines 6,6-dioxides // US3940396 — 1976-02-24.
6. *Chung-Ling Mao, Sandy Hook, Lynn A. Bakker, Derby; John R. Robertson, Newtown, all of Conn.* Polyurethane foams and method of making same // US3821132 — 1974-06-28.
7. *Edward L., Hagen, Woodbury, Conn.* Thienopyrazine dioxides and methods of making same // US3882122 — 1975-05-06.
8. *Vierfond J.M., Legendre L., Mahuteau J., Miocque M.* // Heterocycles. — 1989. — Vol. 29, No 1. — P. 141-153.
9. *Vierfond J.M., Legendre L., Martin C., Rinjard P., Miocque M.* Thièno- et isothiazolo [3,4-b]quinaxalines: synthèse, structure et étude pharmacologique // Eur. J. Med. Chem. — 1990. — 25. — P. 251-255.
10. *Безменова Т.Э., Хаскин Г.И., Слуцкий В.И., Дульнев П.Г., Захаров Л.Н., Кулишов В.И., Стручков Ю.Т.* Взаимодействие солей дитиокарбаминовых кислот с 4-замещенными 2-тиолан- и 3,4-дизамещенными тиолан-1,1-диоксидами. Структурные исследования N-фенилтиолано[3,4-b]тиазолидин-2-тион-5,5-диоксида // ХГС. — 1981. — № 7. — С. 907-912.
11. *Безменова Т.Э.* Химия тиолан-1,1-диоксидов. — К.: Наукова думка, 1981. — 292 с.
12. *Безменова Т.Э., Дульнев П.Г.* Взаимодействие ариламинов с некоторыми β,β-замещенными сульфоланами и β-замещенными сульфоланами-2 и -3 // ХГС. — 1972. — № 9. — С. 1193-1195.
13. *Роженко А.Б., Слуцкий В.И., Хаскин Г.И.* Конденсированные системы на основе тиолан-1,1-диоксида // ХГС. — 1989. — № 12. — С. 1685-1689.