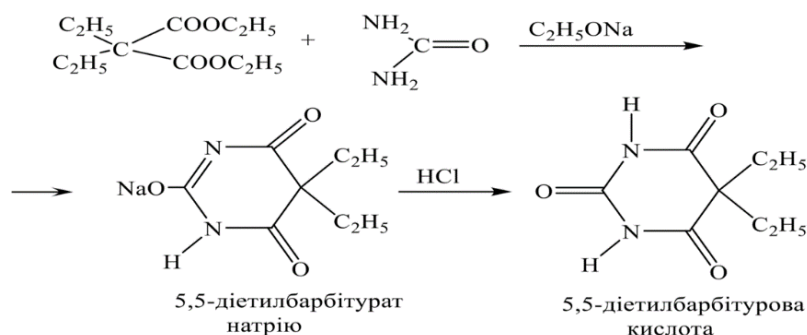


Синтезують барбітурати звичайно конденсацією дизаміщених малонових або ціанооцтових ефірів із сечовиною або диціанамідом у присутності натрію алкоголяту в розчині абсолютного спирту.



Барбітурати — білі кристалічні речовини або біла піноподібна маса, гіркі на смак. Барбітурати — кислоти, практично нерозчинні або малорозчинні у воді, розчинні або важко розчинні у спирті та інших органічних розчинниках, легко розчинні в розчинах лугів. Для підтвердження тотожності барбітуратів проводять реакції утворення комплексних солей з катіонами важких металів, утворення солей дизаміщених похідних оцтової кислоти, реакції конденсації та реакції на функціональні угруповання.

Також, барбітурову кислоту використовують у синтезі рибофлавіну, піримідину, віолурової та сечової кислот.

За результатами дослідження бачимо, що найбільш раціональним є спосіб добування барбітурової кислоти конденсацією сечовини з етиловим естером маленової кислоти з етиловим спиртом та алкоголятом натрію. Завдяки седативній дії похідні барбітурової кислоти почали використовуватись у медицині, а саму кислоту використовують в органічному синтезі.

**Висновки.** Отже, ми розглянули метод та значення синтезу барбітурової кислоти, порівняли вихід продукту у різних методах отримання речовини та переконались у вагомому внеску реакції Байера у сучасний світ хімії та медицини.

### ДОКІНГОВІ ДОСЛІДЖЕННЯ 3-АЛКІЛ/БЕНЗИЛ-6-ХЛОРО-2-(2-ОКСО-2Н-ХРОМЕН-3-ІЛ)ХІНАЗОЛІН-4(3Н)-ОНІВ У ЯКОСТІ ЛІГАНДІВ ДО TRMD

Беляєва Д. О., Власов С. В.

Національний фармацевтичний університет, Харків, Україна

sergiy.vlasov@gmail.com

**Вступ.** Дослідження 6-хлорохіназолін-4-онів опубліковані в останні роки показують, що сполуки із даним фрагментом заміщеним при атомі Нітрогена у положенні 3 є перспективними протимікробними агентами та діють на *P. aeruginosa*. Застосовуваними у клінічній практиці є кумаринові антибіотики і протимікробна активність притаманна також деяким природним кумаринам. Ферментом, який може бути мішенню для цілеспрямованого пошуку протимікробних засобів є tRNA (гуанін37-N1)-метилтрансфераза (EC2.1.1.228; TrmD), для якого виявлена ключова роль цього для виживання бактерій (у тому числі *P. aeruginosa*) у момент дії несприятливих факторів.

**Мета дослідження.** Зважаючи на протимікробні властивості 6-хлорохіназолін-4-онів та кумаринів, метою нашого дослідження стало обґрунтування доцільності синтезу гібридних молекул, які гнучко поєднують ці два фармакофорні фрагменти для подальшого пошуку на їх основі сполук із протимікробною активністю, яка може реалізовуватися через інгібування бактеріальної TrmD.

**Матеріали та методи.** Програми: ISISDraw 2.3, Discovery studio Visualizer 4.0, Python molecule viewer та Autodock Vina. Докінгові дослідження проводили на моделях гнучких лігандів та жорсткої молекули протеїну. Кристалографічні дані для ферментів PaTrmDc, отримано з *P. aeruginosa* (5ZHN) із Protein Data Bank (<http://www.rcsb.org/pdb>).

**Результати дослідження.** Нами було проведено моделювання зв'язування з PaTrmDc, отримано з *Pseudomonas aeruginosa* із представниками віртуальної бібліотеки 3-алкіл/бензил-6-хлоро-2-(2-оксо-2*H*-хромен-3-іл)хіназолін-4(3*H*)-онів та встановлено можливість їх взаємодії із окремим амінокислотами активного сайту ферменту. Для всіх варіантів замісників положення 3 6-хлорохіназолін-4-ону, а саме безильного, бутильного, гексильного, циклогексильного та октильного взаємодія з PaTrmDc є вірогідною, проте із ростом довжини замісника параметри зв'язування погіршуються.

**Висновки.** Зважаючи на це можливим є планування синтезу 3-алкіл/бензил-6-хлоро-2-(2-оксо-2*H*-хромен-3-іл)хіназолін-4(3*H*)-онів із замісниками середнього розміру (бензил, гексил, бутил) для їх подальшого протимікробного скринінгу.

## ІСТОРІЯ СТВОРЕННЯ І СИНТЕЗ ІБУПРОФЕНУ

Бричак А. І., Сюмка Є. І.

Науковий керівник: Шпичак Т. В.

Національний фармацевтичний університет, Харків, Україна

shpuchaktamara@gmail.com

**Вступ.** У 2021 р. виповнюється 60 років з «дня народження» відомого препарату ібупрофену, який став одним із найпопулярніших безрецептурних знеболюючих, жарознижувальних і протизапальних засобів у світі. Всесвітня організація охорони здоров'я внесла ібупрофен до переліку основних життєво необхідних і важливих лікарських препаратів. Він використовується у понад 120 країнах світу та ефективно застосовується мільйонами людей для лікування різноманітного болю і запалення, входить до складу багаточисленних лікарських форм, у тому числі дитячих.

**Мета дослідження.** Проаналізувати історичні факти і передумови щодо створення ібупрофену.

**Матеріали та методи.** Інформаційні і літературні джерела, які висвітлюють наукову діяльність професора Стюарта Адамса і синтез ібупрофену – 2-(4-ізобутил)фенілпропіонової кислоти.

**Результати дослідження.** Стюарт Адамс працював в аптеках як кур'єр, і саме цей досвід пробудив у ньому бажання навчатися на фармацевта. Він поступив у Ноттінгемський університет, а після закінчення якого продовжив роботу за спеціальністю. Пізніше отримав докторський ступінь в області фармакології в університеті Лідса. У 1952 р. Стюарт Адамс почав