

СИНТЕЗ ТА ВСТАНОВЛЕННЯ ПРОСТОРОВОЇ СТРУКТУРИ 2-АМІНО-4,7-ДІАРИЛ-3-ЦІАНО-5,6,7,8-ТЕТРАГІДРО-4Н-ХРОМЕНІВ

Воронович А.С., Левашов Д.В., Шемчук Л.А.

Національний Фармацевтичний Університет

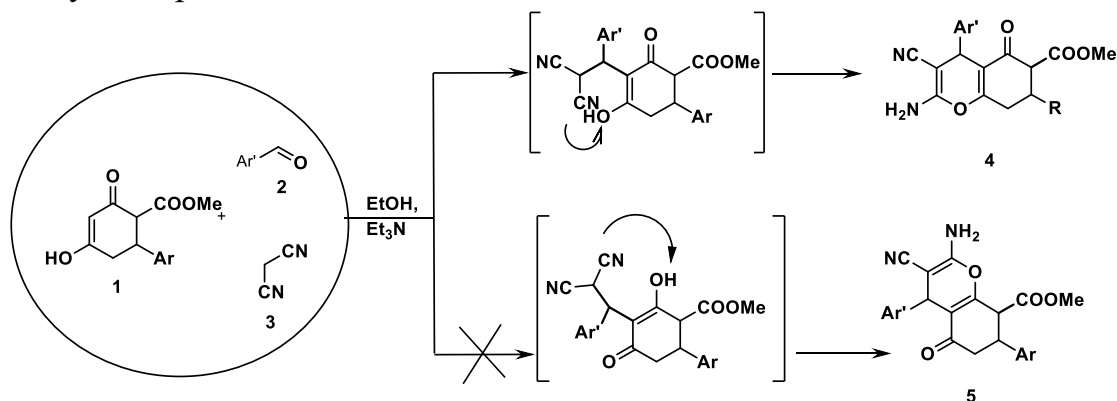
voronovichandrey@gmail.com

Вступ: Похідні пірану виявляють велику різноманітність фармакологічної активності (протизапальну, антибактеріальну, антикоагулянтну та ін.), що обумовлює актуальність синтезу їх нових похідних з метою пошуку нових біологічно активних речовин.

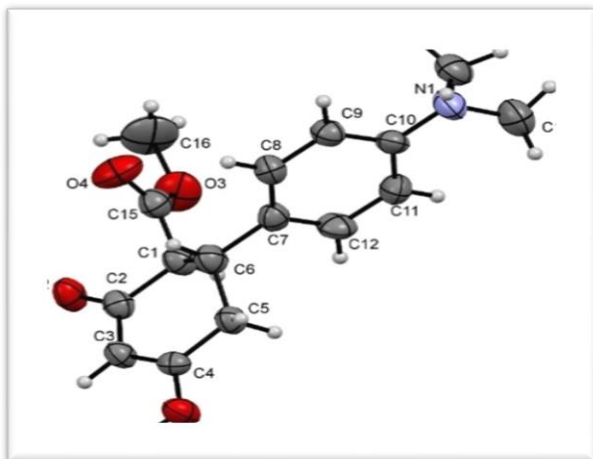
Мета: Синтез нових похідних 2-аміно-4,7-діарил-3-ціано-5,6,7,8-тетрагідро-4Н-хроменів шляхом трикомпонентної однореакційної взаємодії естерів 4-гідрокси-2-оксо-6-арилциклогексен-2-карбонової кислоти з ароматичними альдегідами і малононітрилом, та встановлення просторової будови за допомогою рентгеноструктурного аналізу.

Матеріали та методи: У ході досліджень застосовано методи органічного синтезу та ІЧ, ¹H, ¹³C ЯМР-спектроскопії, хромато-мас-спектрометрії, методи рентгеноструктурного аналізу монокристалів.

Результати та їх обговорення: Використання складних ефірів **1** в якості енольнуклеофіла в трикомпонентній реакції з ароматичними альдегідами і малононітрилом дозволило розробити простий і ефективний метод синтезу нових карбоанельованих похідних 2-аміно-4Н-пірана, зокрема, 2-аміно-3-ціано-5,6,7,8-тетрагідро-4Н-хроменів **4** з високими виходами з легкодоступних реагентів.



Одним з найскладніших завдань є визначення складу і просторової структури синтезованих сполук, особливо якщо в процесі синтезу може утворитися кілька стереоізомерів. Складні ефіри **1** містять два асиметричних вуглецю і, отже, можуть існувати у вигляді двох пар енантіомерів: пари енантіомерів з транс-розташуванням ефірної групи і арилового залишку і пари енантіомерів з цис-конфігурацією. Аналіз ¹H ЯМР-спектрів показав, що з двох можливих пар енантіомерів, які знаходяться в транс-конфігурації, утворюється тільки одна. Теоретично при цій трикомпонентній взаємодії



можливе утворення двох ізомерів залежно від атома кисню ефіру **1**, з яким протікає гетероциклізація: 6-заміщеного **4** або 8-заміщеного **5**. Пошук з використанням Кембриджської структурної бази даних показав, що рентгеноструктурні дослідження складних ефірів не проводилися. Використання рентгенівської дифракції дозволило встановити, що сполуки в кристалічному стані знаходяться в 4-гідроксиформі

Висновки: Синтезовано та встановлено просторову будову нових 2-аміно-3-ціано-5,6,7,8-тетрагідро-4Н-хроменів. Ці дослідження стануть базою для подальших фармакологічних досліджень

ПОРІВНЯННЯ ПОКАЗНИКІВ ФАРМАКОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ПОХІДНИХ 5-(2,4-, 3,4-ДИМЕТОКСИФЕНІЛ)-3Н-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОНІВ, ЩО ОТРИМАНІ В РЕЗУЛЬТАТІ ОНЛАЙН ПРОГНОЗУВАННЯ ТА ЛАБОРАТОРНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

Довбня Д. В., Каплаушенко А. Г., Литвиненко Т. М.

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет

Запоріжжя, Україна

dima.dovbnya@ukr.net

Вступ. Незважаючи на значний науковий прогрес людство по сьогоднішній день для життєдіяльності потребує використання лікарських засобів, яких на фармацевтичному ринку величезна кількість. Але кожного року виникають нові захворювання, що потребують специфічного лікування та існуючі лікарські засоби не можуть з ними впоратись. Тому створення лікарських засобів залишається актуальним завданням для всього людства, одним з важливих етапів у цьому процесі є дослідження біологічних активностей синтезованих сполук. У ХХІ столітті створюється все більше комп'ютерних сервісів для прогнозування фармакологічної активності речовин, але отримані результати не завжди є достовірними. Тому порівняння результатів отриманих шляхом прогнозування та лабораторних досліджень є актуальним питанням.

Мета. Проаналізувати достовірність результатів отриманих шляхом використання комп'ютерних сервісів для прогнозування фармакологічної активності речовин шляхом їх порівняння з результатами отриманими при лабораторних дослідках.

Методи. В ході роботи були використані методи аналізу та порівняння.

Результати. Під час виконання роботи було проведено прогнозування показників фармакологічної активності похідних 5-(2,4-, 3,4-диметоксифеніл)-