

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА
ІНСТИТУТ ФІЗИКО-ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ І ВУГЛЕХІМІЇ
ІМ. Л. М. ЛИТВИНЕНКА НАН УКРАЇНИ

ХІМІЧНІ ПРОБЛЕМИ СЬОГОДЕННЯ



II Міжнародна (XII Українська) наукова конференція
студентів, аспірантів і молодих учених

ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ



До Міжнародного року періодичної системи Менделєєва

19–21 березня 2019 р.
м. Вінниця

*Затверджено Вченою радою Донецького національного університету
імені Василя Стуса (протокол № 8 від 01.03.2019 р.)
Посвідчення про рестрацію ДНУ «УкрІНТЕІ» № 82 від 26.02.2019 р.*

Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2019): збірник тез доповідей II Міжнародної (XII Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 19–21 березня 2019 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. Вінниця, 2019. 248 с.

З 19 по 21 березня 2019 року в Донецькому національному університеті імені Василя Стуса відбулася II Міжнародна (XII Українська) наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення» (ХПС-2019).

У збірнику опубліковані результати досліджень, які виконані в навчальних закладах та наукових установах України, Азербайджану, Російської Федерації, Польщі, Естонії, Бразилії, Німеччини в галузях аналітичної, квантової, неорганічної, органічної, фізичної, медичної та фармацевтичної хімії, біохімії, хімічної освіти, хімічної інженерії, хімії полімерів і композитів.

Партнери конференції:

ТОВ «УкрХімАналіз»
Науково-сервісна фірма «ОТАВА»
Асоціація «Парфумерія та косметика України»
Студентська рада ДонНУ імені Василя Стуса
ТОВ «Хімлаборреактив»
Вінницька торгово-промислова палата
Приватне підприємство «Інструмент-Сервіс»
ТОВ «АЛСІ-ХРОМ»
ТОВ «МіксЛаб»
ТОВ «НВП «Укроргсинтез»

Редакційна колегія: О. М. Шендрик (відп. ред.)
С. В. Жильцова (відп. секр.)
Й. О. Опейда
С. В. Радіо
Г. М. Розанцев
О. М. Швед

Адреса редколегії: 21021, м. Вінниця, вул. 600-річчя, 21, Навчально-науковий інститут хімії Донецького національного університету імені Василя Стуса.

СИНТЕЗ ТА БУДОВА

3-[2-(1*H*-ІМІДАЗОЛ-2-ІЛ)-АЛКІЛ]-2-ТІОКСО-2,3-ДИ-ГІДРО[1]БЕНЗОФУРО[3,2-*D*]ПІРИМІДИН-4(1*H*)-ОНІВ

*Завада О. О.*¹, Ткаченко О. В.², Журавель І. О.³

¹Харківський національний медичний університет, м. Харків, Україна

²Національний фармацевтичний університет, м. Харків, Україна

³Харківська медична академія післядипломної освіти, м. Харків, Україна

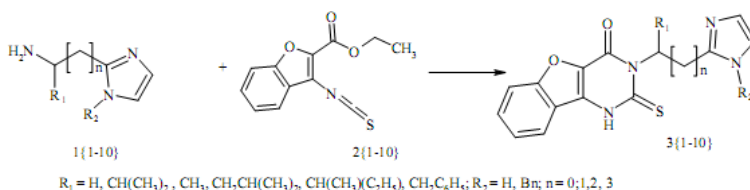
o.o.zavada@ukr.net

На теперішній час існує велика кількість протигрибкових засобів, але слід зауважити, що досить часто постає проблема рецидивів при лікуванні дерматомікозів. Виходячи з цього важливою проблемою нині є пошук нових препаратів цієї групи, тому ціленаправлений синтез молекул з вираженою протигрибковою дією є важливою задачею.

З метою синтезу нових речовин з протигрибковою дією, нами була побудована фокусована бібліотеки сполук з зазначеною біологічною активністю, для цього використано стратегію поєднання в одній молекулі фрагментів бензофуоро[3,2-*d*]піримідину з імідазольним залишком.

Головним критерієм для подальшого синтезу та вивчення біологічної активності був інтегральний показник «drug-likeness», який виражає загальний фармакологічний потенціал сполуки, виходячи з цього синтезовано найбільш перспективні сполуки. Проведено ряд перетворень для синтезу 3-[2-(1*H*-імідазол-2-іл)-алкіл]-2-тіоксо-2,3-дигідро[1]бензофуоро[3,2-*d*]піримідин-4(1*H*)-онів **3{1-10}** (схема 1). Конденсацію етилового естеру 3-ізоціанато-1-бензофуран-2-карбонОВОЇ кислоти **2** з 2-(α,β , ω -аміноалкіл)імідазолами **1{1-10}** проводили при кип'ятінні у пропанолі-2 в присутності еквівалентної кількості 50 % розчину КОН. Утворення продуктів реакції контролювали методом ТІХХ.

Схема 1



Структуру одержаних 3-[2-(1*H*-імідазол-2-іл)-алкіл]-2-тіоксо-2,3-дигідро[1]бензофуоро[3,2-*d*]піримідин-4(1*H*)-онів **3{1-10}** підтверджено даними ¹Н ЯМР-спектроскопії. В ¹Н ЯМР-спектрах сполук **3{1-10}** наявні сигнали протонів бензофуранового кільця у вигляді двох дублетних сигналів протонів в діапазонах δ 7.68 – 7.80 м.ч. (H-6) та δ 7.99 – 8.16 м.ч. (H-9) та двох триплетних сигналів протонів в діапазонах δ 7.58 – 7.74 м.ч. (H-7) та δ 7.38 – 7.50 м.ч. (H-8). Сигнали протонів *CH*-груп імідазолу знаходяться у вигляді синглетів при δ 7.10–7.28 м.ч. та 6.80–6.94 м.ч. Сигнал протону *NH* піримідинового циклу проявляється у вигляді уширеного синглету при δ 13.76 – 13.88 м.ч. Сигнал протону *NH* імідазолідного циклу реєструється у вигляді уширеного синглету при δ 13.78 – 14.16 м.ч.

Синтезовано низку нових похідних імідазолу, перспективних речовин з протигрибковою активністю.