

СИНТЕЗ ІМІНІВ НА ОСНОВІ 4-АМІНОАНТИПІРИНУ ТА 3-(5-АРИЛ-2-ФУРИЛ)-2-МЕТИЛАКРИЛАЛЬДЕГІДІВ

*Балинов С. В.*¹, Скрипська О. В.¹, Горак Ю. І.²

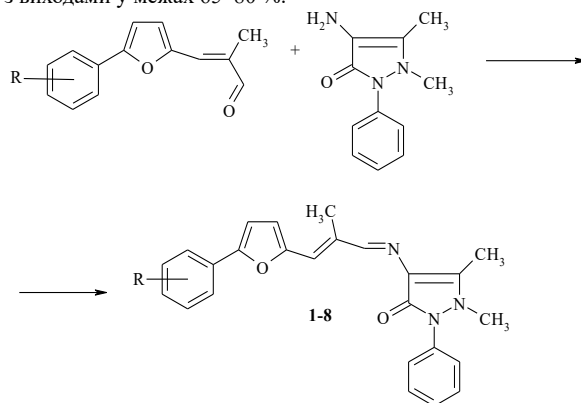
¹Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Навчально-науковий інститут біології, хімії та біоресурсів, Чернівці, Україна

²Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна
s.balinov@chnu.edu.ua

Похідні піразолону є важливою групою лікарських засобів, терапевтична ефективність яких підтверджена клінічною практикою. До найбільш розповсюджених представників цього класу належать метамізол натрію (нестероїдний анальгетик), феназон (антипіретик) та фенілбутазон (протизапальний засіб).

Паралельно з піразолоновим циклом значну фармакофорну цінність має арилфурановий замісник. Сполуки, що містять цей фрагмент (зокрема, нітрофудан та дантролен), характеризуються здатністю моделювати функції центральної нервової системи та серцевий ритм. Речовини, що мають у своїй структурі арилфурановий замісник також виявляють антимікробні, фунгіцидні та протипухлинні властивості.

Гіпотеза дослідження ґрунтується на припущенні, що поєднання піразолонового та арилфуранового фрагментів у структурі єдиної молекули дозволить отримати сполуки з потенційно розширеним спектром біологічної активності. З цією метою було проведено конденсацію 4-аміноантипірину з 3-(5-арил-2-фурил)-2-метилакрилальдегідами у бутанолі у реакторі синтезу Monowave 50. У результаті реакції синтезовано ряд основ Шиффа (**1-8**) з виходами у межах 65–80 %.



R = 2,5-Cl₂ (**1**); 2-NO₂-4-Cl (**2**); 4-NO₂ (**3**); 2,4-Cl₂ (**4**); 2-OCH₃-4-NO₂ (**5**); 2-NO₂-4-OCH₃ (**6**); 2-NO₂-4-CH₃ (**7**); 2-Cl-5-CF₃ (**8**).

Прогноз *in silico* (SwissADME) підтвердив відповідність синтезованих сполук правилу Ліпінські, що вказує на ймовірну високу біодоступність.

Згідно з результатами *in silico* скринінгу в системі SuperPred отримані азометини є перспективними нейротропними, антикоагулянтними та антибактеріальними агентами. Результати онлайн-прогнозування профілю токсичності вказують на безпечність отриманих речовин, класифікуючи їх як малотоксичні або нетоксичні сполуки.