



Міністерство охорони здоров'я України  
Міністерство освіти і науки України  
Національний фармацевтичний університет  
Кафедра фармацевтичної хімії  
Кафедра медичної хімії  
Кафедра загальної хімії  
Кафедра аналітичної хімії та аналітичної токсикології

Міжнародна internet-конференція

# Modern chemistry of medicines

18 травня 2023 р.  
м. Харків, Україна

Повідчення Державної наукової  
установи «Український інститут  
науково-технічної експертизи та  
інформації» № 550 від 19.12.2022 року

Міністерство охорони здоров'я України  
Міністерство освіти і науки України  
Національний фармацевтичний університет  
Кафедра фармацевтичної хімії  
Кафедра медичної хімії  
Кафедра загальної хімії  
Кафедра аналітичної хімії та аналітичної токсикології

Ministry of health of Ukraine  
Ministry of education and science of Ukraine  
National university of pharmacy  
Pharmaceutical chemistry department  
Medicinal chemistry department  
General chemistry department  
Analytical chemistry and analytical toxicology department

# **MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES**

**Матеріали**  
**Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,**  
**18 травня 2023 року**

**Materials**  
**of the International Internet Conference 'Modern chemistry of medicines',**  
**May 18, 2023**

**ХАРКІВ**  
**KHARKIV**  
**2023**

УДК 615.3(06)

М 78

Електронне видання мережне

**Редакційна колегія:** проф. Котвіцька А. А., проф. Владимірова І. М., проф. Георгіянц В.А., проф. Перехода Л.О., проф. Журавель І.О., проф. Колісник С.В., доц. Криській О.С., проф. Власов С.В., ас. Смелова Н.М., ас. Григорів Г.В.

Конференція зареєстрована в УкрІНТЕІ (посвідчення № 550 від 19.12.2022 р.)

**М78** **Modern** chemistry of medicines: матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (18 травня 2023 р., м. Харків) – Електрон. дані. – Х. : НФаУ, 2023. – 284 с. – Назва з тит. екрана.

Збірник містить матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (18 травня 2023 р., м. Харків) присвячені висвітленню сучасних тенденцій створення оригінальних АФІ синтетичного та рослинного походження, фармацевтичної розробки, забезпечення якості лікарських засобів.

Для широкого кола наукових та практичних фахівців у галузі фармації та медицини, магістрантів, аспірантів, докторантів, співробітників фармацевтичних підприємств, викладачів закладів вищої освіти.

*Редколегія не завжди поділяє погляди авторів.*

*Автори опублікованих матеріалів несуть повну відповідальність за підбір, точність наведених фактів, цитат, економіко-статистичних даних, власних імен та інших відомостей.*

*Матеріали подаються мовою оригіналу.*

УДК 615.3(06)

© НФаУ, 2023

## МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДИЗАЙН ВІРТУАЛЬНОЇ КОМБІНАТОРНОЇ БІБЛІОТЕКИ НОВИХ ПОХІДНИХ [1,2,4]ТРИАЗИНО[2,3-с]ХІНАЗОЛІНУ ЯК ПОТЕНЦІЙНИХ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН

Кучеренко Л.І., Скорина Д.Ю., Созонік Н.В.

*Запорізький державний медико-фармацевтичний університет,*

*Запоріжжя, Україна*

*skoryna.d.yu@gmail.com*

**Вступ.** У сучасному суспільстві поширення нейродегенеративних захворювань набуває значних масштабів. Цей тип патологій характеризується повільним перебігом, втратою функціональних властивостей нервової системи і загибеллю нейронів. На жаль, незважаючи на розповсюдження цих хвороб, дієвих ліків для їх терапії досі не існує. Тому спрямований пошук нових агентів для лікування нейродегенеративних захворювань є вкрай актуальним. Перспективними кандидатами у нейротропні засоби є похідних [1,2,4]триазино[2,3-с]хіназоліну, які характеризуються широким спектром біологічної активності.

**Мета.** Проведення молекулярного дизайну віртуальної комбінаторної бібліотеки раніше невідомих похідних [1,2,4]триазино[2,3-с]хіназоліну, а також *in silico* скринінг їхньої біологічної активності та параметрів лікоподібності.

**Матеріали та методи.** Попередні дослідження та проведений огляд літератури дозволили сформулювати концепцію пошуку нових потенційних біологічно активних речовин (БАР) серед похідних [1,2,4]триазино[2,3-с]хіназоліну. Для конструювання інноваційних БАР був проведений молекулярний дизайн віртуальної комбінаторної бібліотеки на основі 6-(циклоалкілтіо)-3-*R*-2*H*-[1,2,4]триазино[2,3-с]хіназолін-2-онів. Прогнозування біологічної активності сполук проведено з використанням сервісу PASS C&T, токсичності – сервісу GUSAR. Розрахунок фармакокінетичних параметрів і параметрів лікоподібності здійснювали за допомогою сервісу SwissADME.

**Результати та їх обговорення.** В межах проведеного дослідження з пошуку нових фармакологічно цінних сполук серед 6-(циклоалкілтіо)-3-*R*-2*H*-[1,2,4]триазино[2,3-с]хіназолін-2-онів на основі принципів молекулярного дизайну була згенерована комбінаторна бібліотека потенційних БАР, що складається з 25 сполук. Доцільність поєднання атома сульфуру в 6 положенні з циклоалкільним фрагментом обумовлена можливістю зміни як профілю, так і вираженості фармакологічної дії. Зміна розміру карбоциклічного фрагменту буде суттєво впливати на ліпофільність і, як наслідок, на фармакокінетичні параметри сполук. Варіювання замісника в 3 положенні модифікує, як фармакокінетичні, так і фармакодинамічні параметри. *In silico* прогноз показав, що досліджуваним речовинам притаманна нейротропна активність, зокрема протипаркінсонічна дія. Вони відповідають критеріям лікоподібності за Ліпінським та мають задовільні фармакокінетичні параметри, необхідні для перорального прийому.

**Висновки.** Здійснено молекулярний дизайн віртуальної комбінаторної бібліотеки нових похідних [1,2,4]триазино[2,3-с]хіназоліну. Для модельних речовин проведено комплекс *in silico* досліджень, що підтвердили їх потенціал як перспективних біологічно активних агентів.