

АЛГОРИТМ СТВОРЕННЯ НОВИХ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН СЕРЕД ПОХІДНИХ КСАНТИНІЛ-7-АЦЕТАТНИХ КИСЛОТ

К. В. Александрова, Д. М. Сінченко, С. В. Левіч

Запорізький державний медичний університет

darja.yurchenko@yandex.ru

Створення нових високоактивних, малотоксичних біологічно активних речовин спрямованої дії є актуальною проблемою фармацевтичної буденності, яка в теперішній час потребує чіткого алгоритму. Метою нашої роботи було розробка дизайну дослідження зі створення перспективних нейропротекторів серед похідних ксантину. В якості базових структур були відібрані молекули ксантин-7-ацетатних кислот, оскільки поєднання в одній молекулі природного гетероциклу та залишку ацетатної кислоти, здатної до функціоналізації введенням різноманітних радикалів, відкриває простір для реалізації мети дослідження.

Першим етапом в дизайні дослідження стало використання комп'ютерних програм для розрахунку ряду властивостей молекул молекулярна маса, ліпофільність ($\log P$), розчинність ($\log S$), молярна рефракція, відповідність «правилу п'яти Ліпінські» з урахуванням Pre-discovery. Аналіз одержаних даних дозволив відібрати речовини, що є мають у своїй структурі реакційноздатну функціональну групу та мають низький рівень токсичності, а також в високою долею вірогідності проявляють бажану активність. Другим етапом був підбір оптимальних умов для синтезу de novo базових молекул та введення фармакофорних угруповань. Наступний етап включав in vitro дослідження антиоксидантної активності із впливом на різні ланки оксидативного та нітрозуючого стресів. Лідери після проходження фармакологічного скринінгу відправлялись для вивчення досліджуваного виду активності на модельній патології in vivo. Аналіз отриманих даних дозволив спрогнозувати механізм дії потенційного «хіта».

Отже, використання зазначеного алгоритму для створення перспективних біологічно активних речовин є зручним алгоритмом для пошуку сполук з нейропротективною дією серед похідних ксантин-7-ацетатних кислот.

СИНТЕЗ ПОХІДНИХ ГІДРАЗИДІВ 3,5-ДИБРОМ-2-ХЛОРБЕНЗОЙНИХ КИСЛОТ ТА ПОШУК НА ЇХ ОСНОВІ ПОТЕНЦІЙНИХ ПРОТИТУБЕРКУЛЬОЗНИХ ЗАСОБІВ

Д. О. Алферова

Національний фармацевтичний університет, м. Харків

bromatology@nuph.edu.ua

У всьому світі поставлена мета зупинити епідемію туберкульозу і започаткувати тенденції до скорочення захворюваності шляхом створення ефективних лікарських. Основною проблемою в лікуванні туберкульозу стало виникнення лікарсько-резистентних штамів мікобактерій туберкульозу, особливо в країнах з низьким і середнім рівнем доходу, де ця хвороба є однією з трьох основних причин смерті людей у віці від 15 до 44 років.