

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет  
імені В. Н. Каразіна  
Хімічний факультет

**XII Всеукраїнська наукова  
конференція студентів та аспірантів  
"Хімічні Каразінські читання - 2020"  
(ХКЧ'20)**

Тези доповідей

21–23 квітня 2020 року

Харків  
2020

УДК 54 (063)  
Х 46

Конференція зареєстрована у ДНУ «УкрІНТЕІ» МОН України (посвідчення № 832 від 18 грудня 2019 р.)

Рекомендовано до друку рішенням Вченої Ради хімічного факультету від 23 березня 2020 року, протокол № 3.

Тези доповідей представлені за теоретичними та практичними результатами наукових досліджень, виконаних студентами та аспірантами вищих навчальних закладів і науково-дослідницьких установ України.

Для науковців та студентів ЗВО та НДІ України.

Тези доповідей подаються в авторській редакції.

ISBN 978-966-285-571-5

© Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2020



**ХІМІЧНИЙ** ФАКУЛЬТЕТ

---

ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ  
УНІВЕРСИТЕТ імені В. Н. КАРАЗІНА

чественного определения метамизола натрия с учетом его разложения в водных растворах при изучении профилей растворения.....	39
<i>Душна О. М., Плиска М. В., Сизоненко С. В., Дубенська Л. О.</i> Методика полярографічного визначення платифіліну у формі його N-оксиду .....	41
<i>Кобзар Є. Г., Коновалова О. Ю.</i> Оцінка метрологічних характеристик методики визначення харчових барвників Е 110 та Е 129 після гелелектрофорезу.....	43
<i>Кравець П. О., Решетняк О. О.</i> Експрес-контроль Fe(III) у супутньо-пластових підземних водах на рівні нормованої концентрації .....	44
<i>Луткова А. В., Волошина Т. А., Решетняк Е. А.</i> Влияние поверхностно-активных веществ на процесс иммобилизации кислотно-основных индикаторов в отвержденном желатиновом геле .....	46
<i>Маслов О. Ю., Клименко Л. Ю., Шовкова З. В.</i> Розробка та валідація УФ-спектрофотометричної методики кількісного визначення тинідазолу.....	48
<i>Михеенко В. М.</i> Разработка методики количественного анализа на содержание селена в баде «селенохел» методом ЭТААС .....	50
<i>Михнюк О. Н.</i> Экстракция альпразолама, лораземпама и темазепама из различных объектов с дальнейшим хроматографическим определением .....	52
<i>Орач О. В., Решетняк Е. А.</i> Условия извлечения индигокармина в отвержденный желатиновый гель с целью твердофазно-спектрофотометрического и визуально-тестового его определения .....	54
<i>Орешикіна А. Л., Ткаченко С. В.</i> Вміст деяких іонів у стічній воді теплоенергетичного виробництва в залежності від сезонності відбору.....	56
<i>Савченко В. С., Коновалова О. Ю.</i> Виявлення та напівкількісне визначення харчового барвника Е 122 після його електрофоретичного відокремлення.....	58

## Органічна хімія

<i>Ismoilov Sh., Yeromina H. O., Perekhoda L.O.</i> Design and synthesis of novel mannich bases containing 1,2,4-triazole moiety as potential antihypertensive agents: molecular docking study .....	61
<i>Karaush-Karmazin N. M., Baryshnikov G. V., Minaev B. F.</i> DFT study of the one-dimensional tetrathia- and tetraselena[8]circulene-based materials .....	62
<i>Kostiv I. S., Havryliv R. I., Vintoniak S. P.</i> Establishing of the reaction mechanism of [4 + 2] cyclization of 2,3-dimethylbuta1,3-diene to alkylacrylates using the michaelis-menten equation .....	64
<i>Lagron A. V., Kornet M. M., Karpenko Yu. V., Klimova O. O.</i> Virtual screening of potential biological active compounds with antioxidant and radio protector activity .....	66
<i>Utievskiy Yu. A., Komykhov S. A.</i> New 5-aryl / hetaryl-4,7(6,7)-dihydro-azolopyrimidines: synthesis, tautomerisation and its complexation with heavy metal cations.....	68

## VIRTUAL SCREENING OF POTENTIAL BIOLOGICAL ACTIVE COMPOUNDS WITH ANTIOXIDANT AND RADIO PROTECTOR ACTIVITY

*Lagron A. V.<sup>1</sup>, Kornet M. M.<sup>1</sup>, Karpenko Yu. V.<sup>2</sup>, Klimova O. O.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup> Department of Chemistry, Zaporizhzhia National University

<sup>2</sup> Department of Natural Sciences for Foreign Students and Toxicological Chemistry,  
Zaporizhzhia State Medical University

<sup>3</sup> Department of Physiology, Immunology and Biochemistry with a course in Civil  
Protection and Medicine, Zaporizhzhia National University

*alicelagron@gmail.com*

The combinatorial library of S-heterylmodified derivatives of endogenous thiols has 111 structures, which allows it to be effectively used for various chemical software, including for QSAR analysis.

Compounds known for their radioprotective and antioxidant properties - cysteamine and cysteine, were used as key building blocks for the construction of the investigated structures, but their action has certain disadvantages (short duration of action, toxicity, efficacy at high sublethal doses). These disadvantages can be corrected by structural modification of these structures, in particular heterocycles. Quinoline derivatives are known as highly effective antioxidants (Fig. 1).

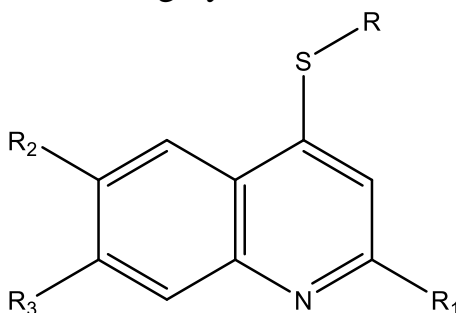


Рис. 1. S-heterylmodified quinoline derivatives with different radicals

For the virtual screening of potential radioprotectors, a chemometric research method, PASS analysis, was selected, which is capable of predicting both radioprotective activity and its presence. Effective bioregulators have a protective effect through an antioxidant mechanism of action, which is known to be the basis for radioprotective action for a whole group of compounds.

All compounds from the combinatorial library exhibited the following activities:

1. free radical scavenger;
2. oxygen scavenger;
3. membrane integrity agonist;
4. radioprotector;
5. embryotoxicity;
6. teratogenicity.

The use of virtual screening provides guidance on the feasibility or inappropriateness of testing a particular substance for a particular activity. It saves time, materials and energy in the search for radioprotective substances.

Virtual evaluation was performed by computerized QSAR analysis using the regression analysis methodology. A number of software tools were used to perform the individual steps of QSAR analysis, such as: PaDEL-Descriptor [1] (software for the calculation of 1875 molecular descriptors; 3D state geometries were fully optimized using the MM2 quantum-chemical method) and BuildQSAR [2] (construction of regression QSAR models based on calculated descriptors and experimental data). QSAR models used 206 descriptors that were non-null and mutually correlated.

Based on the parameters obtained for the individual predictive QSAR models, it can be concluded that their efficiency, stability and expediency are used to identify potentially new derivatives as promising biologically active compounds with radioprotective activity and membrane protectors. This is evidenced by a sufficient indicator of the cross-sectional coefficient –  $q^2$ , that determined for all models within 0,125-0,478 and a high coefficient of statistical significance of the obtained models.

Virtual screening, analysis of the results of regression and statistical analysis of molecular descriptors with the construction of QSAR models for 5 key radioprotective activities allowed to select 26 compounds with potential anti-radical and radioprotective properties.

The study was carried out within the framework of the project "Rational design of S, N-modified amino thiols as potential anti-radiation agents" (№ 0119U000226), led by Kornet M.M., with the support of the Ministry of Education and Science of Ukraine.

[1] De Backer M. M. E., McSweeney S., Lindley P. F. Ligand-Binding and Metal-Exchange Crystallographic Studies on Shrimp Alkaline Phosphatase. *Acta Crystallogr. Sect. D Biol. Crystallogr.* 2004. Vol. 60, Is. 9. P. 1555–1561.

[2] Yap C.W. PaDEL-descriptor: An open source software to calculate molecular descriptors and fingerprints. *Journal of Computational Chemistry.* 2011. Vol. 32, Is. 7. P. 1466–1474.