



**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИКО-ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ**

МАТЕРІАЛИ

**ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО- ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ
«ЗАПОРІЗЬКИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ
ФОРУМ - 2023»**

23-24 листопада 2023 року



Запоріжжя – 2023

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИКО-ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ**

МАТЕРІАЛИ

**ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО- ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ
«ЗАПОРІЗЬКИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ
ФОРУМ - 2023»**

23-24 листопада 2023 року

Запоріжжя – 2023

ОРГКОМІТЕТ

ГОЛОВА ОРГКОМІТЕТУ:

ректор ЗДМФУ, проф. Юрій КОЛЕСНИК

СПІВГОЛОВИ ОРГКОМІТЕТУ:

доц. Микола АВРАМЕНКО, проф. Валерій ТУМАНСЬКИЙ

ЧЛЕНИ ОРГКОМІТЕТУ:

доц. Олександр КРЕМЗЕР, доц. Олексій БІГДАН,
проф. Андрій КАПЛАУШЕНКО, проф. Людмила КУЧЕРЕНКО,
проф. Наталя ТКАЧЕНКО, проф. Олександр ПАНАСЕНКО,
проф. Олексій РИЖОВ

СЕКРЕТАРІАТ КОНФЕРЕНЦІЇ: доц. Людмила ЧЕРКОВСЬКА,
ст.викл. Анна КІНІЧЕНКО, ас. Тамара МАГАНОВА

Технічний супровід:

керівник ЦДОТЯО Вадим ДМИТРИЄВ, доц. Юрій ПИШНОГРАЄВ,
пров.фах. Андрій ЧУРАЄВСЬКИЙ, пров.фах. Яна РЕУТСЬКА

USAGE OF *IN SILICO* METHODS FOR THE SEARCH OF BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS AMONG 6'*H*-SPIRO[CYCLOALKYL-1,5'-TETRAZOLO[1,5-*C*]QUINAZOLINES

O.M. Antypenko¹, T.S. Britanova²

^{1,2}Zaporizhzhia State Medical and Pharmaceutical University (Zaporizhzhia)
antypenkoan@gmail.com¹

Introduction. One of the methods of finding new biologically active compounds is the usage of *in silico* methods. They make it possible to predict the potential activity of compounds based on their structure and interactions with targets, which can reduce the time and cost of researching new drugs.

Based on previously published scientific works, the study of tetrazolo[1,5-*c*]quinazolines is a promising task. Tetrazolo[1,5-*c*]quinazolines are pharmacologically interesting heterocycles that, due to the presence of "pharmacophoric" tetrazole and benzpyrimidine fragments in their structure, exhibit versatile biological activity (actoprotective, antihypoxic, anti-inflammatory, antimicrobial, antifungal, antiradical, etc.). Therefore, research on the search for biologically active compounds among 6'*H*-spiro[cycloalkyl-1,5'-tetrazolo[1,5-*c*]quinazolines] using *in silico* research methods is an important direction in modern medicinal chemistry that can lead to the discovery new potential drugs.

Materials and methods. To predict possible types of biological activity of the proposed compounds, a study was conducted on SwissTargetPrediction [1]. And for the selected biological targets, it was decided to carry out molecular docking.

Results and discussion. According to the results of predictions, compounds should have a high affinity for ligand-dependent ion channels, enzymes, hydrolases and proteases. For example, figure 1 shows a diagram of predicted target classes of compound 2.1.

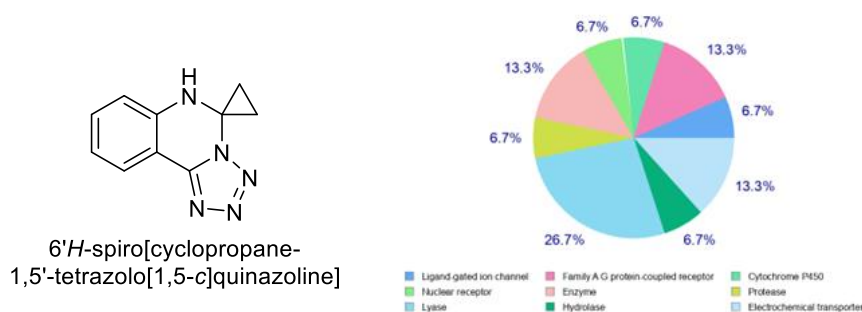


Fig. 1 Predicted biological target of compounds

Conclusions. Most of the proposed spiro derivatives of tetrazoloquinazoline are predicted to have a high probability of inhibiting aminopeptidase PfA-M1. To unambiguously confirm the rationality of the research, it was decided to study the affinity of the studied compounds to M17 leucylaminopeptidase using molecular docking (PDB ID: 4X2T) [2]. The values of affinity for the active center were from -6.5 to -8.3 kcal/mol, which indicates the perspective of further research.

References

1. SwissADME. URL: <http://www.swisstargetprediction.ch/> (дата звернення: 14.03.2023).
2. Drinkwater N., Bamert R. S., Sivaraman K. K., Paiardini A., McGowan S. X-ray crystal structures of an orally available aminopeptidase inhibitor, Tosedostat, bound to anti-malarial drug targets PfA-M1 and PfA-M17. *Proteins*. 2015. Vol. 83(4). P. 789-95.

ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДІВ QBD ПРИ РОЗРОБЦІ СКЛАДУ І ТЕХНОЛОГІЇ ТВЕРДИХ ДИСПЕРСНИХ СИСТЕМ	156
В.В. Яременко, В.В. Федоренко, О.В. Панишева	
ОЦІНКА ЯКОСТІ ВПРОВАДЖЕННЯ ІНСТРУМЕНТІВ УПРАВЛІННЯ НА ФАРМАЦЕВТИЧНОМУ ПІДПРИЄМСТВІ	157
Ірина Ящук, Ліана Унгурян, Оксана Беляєва	
USAGE OF <i>IN SILICO</i> METHODS FOR THE SEARCH OF BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS AMONG 6'H-SPIRO[CYCLOALKYL-1,5'-TETRAZOLO[1,5-C]QUINAZOLINES....	158
О.М. Antypenko, T.S. Britanova	
JUSTIFICATION OF THE OPTIMAL COMPOSITION AND RESEARCH OF A LOCAL HEMOSTATIC AGENT BASED ON POLYSACCHARIDES OF NATURAL ORIGIN.....	159
Audrius Butkevichius, Sergii Sokolovskyi, Igor Sobko	
THE ANTI-INFLAMMATORY ACTIVITY OF 3-MORPHOLYL-SUBSTITUTED 4-ARYL-2- ARYLIMINO-2,3-DIHYDROTHIAZOLE DERIVATIVES	160
Iryna Drapak, Borys Zimenkovsky, Lina Perekhoda, Nataliya Seredynska	
SYNTHESIS, TRANSFORMATION AND BIOLOGICAL PROPERTIES OF S-DERIVATIVES OF 4-AMINO-5-(5-R-PYRAZOL-3-YL)-1,2,4-TRIAZOLE-3-THIOL.....	161
Serhii Fedotov, Andriy Gotsulia	
SYNTHESIS AND PROPERTIES OF SOME 5-(2-BROMO-4-FLUOROPHENYL)-4R-1,2,4- TRIAZOL-3-THIOL DERIVATIVES	162
Valerii Kalchenko, Roman Shcherbyna, Volodymyr Salionov, Oleg Nikiforov	
THE IMPACT OF CHEMOINFORMATICS DATABASES IN MODERN COMPUTER-AIDED DRUG DISCOVERY	163
O.V. Klenina, T.I. Chaban	
INTERPRETABLE QSAR MODELING FOR ANTI-INFLAMMATORY AGENTS IDENTIFICATION AMONG 3H-THIAZOLO[4,5-B]PYRIDINES.....	164
O.V. Klenina	
WHY DO WE AGE? THE MAIN SIGNS OF AGING	165
Ugis Kletnieks, Sergii Sokolovskyi	
PROSPECTS FOR THE USE OF CRANBERRY LEAF EXTRACTS IN THE CORRECTION AND PREVENTION OF METABOLIC DISORDERS	166
Oleh Koshovyi, Inna Vlasova, Ganna Kravchenko, Roman Hrytsyk, Lyubov Grytsyk, Ain Raal	
INTERNATIONAL ISO CERTIFICATION IN PHARMACEUTICAL PRODUCTION.....	167
Anton V Kurinnyi, Pasquale Tucci	
MODERN ASPECTS OF PHARMACEUTICAL SERVICES RESEARCH IN UKRAINE.....	168
T.V. Mahanova, N.O. Tkachenko	
STUDY THE TOTAL CONTENT OF HYDROXYCINNAMIC ACIDS IN THE TINCTURE OF GREEN TEA LEAVES	169
Oleksandr Maslov, Sergii Kolisnyk, Alla Koval, Olga Antonenko	
DESIGN AND BIOLOGICAL POTENTIAL OF 5-PHENYL-4-(PARA-TOLYL)-1,2,4- TRIAZOLE-3-THIOL DERIVATIVES	170
Mohammed Amine El Aouni, Andriy Gotsulia	