



Міністерство охорони здоров'я України
Тернопільський національний медичний
університет імені І. Я. Горбачевського
Міністерства охорони здоров'я України

**Матеріали X науково-практичної
конференції з міжнародною участю**

**НАУКОВО-ТЕХНІЧНИЙ ПРОГРЕС І
ОПТИМІЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ
ПРОЦЕСІВ СТВОРЕННЯ
ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТІВ**

**присвячена пам'яті завідувача кафедри
управління та економіки фармації з
технологією ліків, доктора
фармацевтичних наук, професора
Тараса Андрійовича Грошового**

17-18 жовтня 2024 року

MOLECULAR DOCKING N-((5-PHENYL-6,11-DIHYDRO-5H-[1,2,4]TRIAZOLO[1',5':1,6]PYRIDO[3,4-B]INDOL-2-YL)-METHYL)-R-AMIDE AND EVALUATION OF THEIR BIOLOGICAL PROPERTIES

Fedotov S., Gotsulya A.

Zaporizhzhya State Medical and Pharmaceutical University,

Zaporizhzhya, Ukraine

serjioolegovich@gmail.com

Topicality. Current trends in organic synthesis open up opportunities for chemical modification of 1,2,4-triazole by combining this heterocycle with pharmacophore groups of different nature [1]. This contributes to the formation of new and practically significant biological properties in the compounds obtained, which allows to open new biologically active substances [2]. Indole and its derivatives are characterized by well-known distribution among biologically active compounds of both natural and synthetic origin [3]. Therefore, the study of the properties of new compounds that combine in their structure derivatives of Indole and 1,2,4-triazole, are endowed with common features of relevance and are practically appropriate.

The purpose of the work. Theoretical justification for the search for biologically active compounds in a series of innovative N-((5-phenyl-6,11-dihydro-5H-[1,2,4]triazolo[1',5':1,6]pyrido[3,4-b]indol-2-yl)-methyl)-R-amide.

Materials and methods. To achieve a certain goal, a molecular dock method was applied, which uses a wide range of modern computing algorithms to forecast and analyze the interaction of molecules. This approach allows you to determine the possible nature and number of chemical bonds with certain enzyme binding sites, as well as evaluate the energy of interaction and spatial configuration of molecules. Ligand models were created using MarvinSketch 6.3.0, HyperChem 8 and AutodockTools-1.5.6. Discovery Studio 4.0 and AutodockTools-1.5.6 were used to prepare enzymes. Molecular dock was performed using Vina, which allows you to predict and evaluate the interactions between a ligand and a three-dimensional structure of target protein, taking into account their energy and spatial compatibility.

Results. Prescreening analysis of the virtual library of compounds N-((5-phenyl-6,11-dihydro-5H-[1,2,4]triazolo[1',5':1,6]pyrido[3,4-b]indol-2-yl)-methyl)-R-amides, which are potential candidates for further synthesis of biologically active substances. The Vina software analyzed the active centers of model enzymes, which made it possible to understand more deeply the interaction of enzymes with their substrates. The results of studies have shown that the highest potential for the detection of anti-inflammatory and anticancer properties have N-((5-phenyl-6,11-dihydro-5H-[1,2,4]triazolo[1',5':1,6]pyrido[3,4-b]indol-2-yl)-methyl)-R-amides with an unbranched phenyl substituent. Instead, fluor- and chloro- of this substitute indicate the high probability of manifestation of antifungal properties.

Conclusions. The obtained prognostic characteristics that allow us to evaluate the prospects for the creation of biologically active substances on the basis of N-((5-phenyl-6,11-dihydro-5H-[1,2,4]triazolo[1',5':1,6]pyrido[3,4-b]indol-2-yl)-methyl)-R-amides look quite promising. The results of pharmacodynamic studies in Silico indicate this group of compounds as a possible source for the development of biologically active substances with anti-inflammatory, antifungal and anticancer activity.

List of sources used.

1. Lopatik, D. & Kuvaeva, Z. & Naidenov, V. & Bondareva, O. & Tychinskaya, L.. (2021). Synthesis of S-aminoalkyl derivatives of 1,2,4-triazolo[5,6-b]indole. Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus, Chemical Series. 57. 294-299. 10.29235/1561-8331-2021-57-3-294-299.

2. López-Rodríguez ML, Porrás E, Morcillo MJ, Benhamú B, Soto LJ, Lavandera JL, Ramos JA, Olivella M, Campillo M, Pardo L. *J. Med. Chem.* 2003; 46.

3. Varney MD, Marzoni GP, Palmer CL, Deal JG, Webber S, Welsh KM, Bacquet RJ, Bartlett CA, Morse CA. *J. Med. Chem.* 1992; 35: 663

Typlynska K., Kondratova Y., Horyn M., Logoyda L.

ULTRA-PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHY–MASS SPECTROMETRY METHODS FOR THE DETERMINATION OF THE RESIDUAL QUANTITIES OF RAMIPRIL AND HYDROCHLOROTHIAZIDE FOR CONTROLLING THE CLEANING OF EQUIPMENT

114

РОЗДІЛ 7. ОПТИМІЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ ПОШУКУ І СТВОРЕННЯ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ (СИНТЕЗ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ СПОЛУК)

Іванченко Д., Крісанова Н.

ПОШУК ПЕРСПЕКТИВНИХ ДІУРЕТИЧНИХ ЗАСОБІВ СЕРЕД 7-АРИЛ-8-ЛІДЕНГІДРАЗИНОКСАНТИНІВ

116

Іванченко Д., Рудько Н.

СИНТЕЗ, ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ТА БІОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОХІДНИХ 1-П-ХЛОРОБЕНЗИЛ-8-БРОМО-7-ЕТИЛ-3-МЕТИЛКСАНТИНУ

117

Коробко Д.

ХІМІЧНА МОДИФІКАЦІЯ МОЛЕКУЛИ ТЕОФІЛІНУ – ПЕРСПЕКТИВНИЙ НАПРЯМОК СТВОРЕННЯ ОРИГІНАЛЬНИХ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН

118

Федотов С., Гоцуля А.

СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ S-алкілпохідних 5-(3-(ІНДОЛ-3-ІЛ)ПРОПІЛ)- 4-(2-МЕТОКСИФЕНІЛ)-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІОЛУ

119

Antypenko L., Arisawa M.

FROM DESIGN TO DRUG-LIKENESS OF NOVEL PACLOBUTRAZOL-DERIVED COMPOUNDS

120

Antypenko L., Hrytsak O., Shabelnyk K.

DRUG-LIKENESS OF NOVEL HETARYL/CYCLOALKYL/SPIRO [1,2,4]TRIAZOLO[1,5-c]QUINAZOLINE CARBOXYLIC ACIDS' SALTS

121

Fedotov S., Gotsulya A.

MOLECULAR DOCKING N-((5-PHANYL-6,11-DIHYDRO-5H-[1,2,4]TRIAZOLO[1',5':1,6]PYRIDO[3,4-B]INDOL-2-YL)-METHYL)-R-AMIDE AND EVALUATION OF THEIR BIOLOGICAL PROPERTIES

123

Klenina O., Chaban T.

CURRENT TRENDS IN THE DEVELOPMENT OF POTENTIAL ANTIMICROBIAL DRUG CANDIDATES AMONG CONDENSED THIAZOLO[4,5-b]PYRIDINE DERIVATIVES

124

Klenina O.

MOLECULAR DOCKING STUDIES OF 3H-THIAZOLO[4,5-b]PYRIDINE-2-ONE DERIVATIVES AS POTENTIAL COX-1/2 INHIBITORS

125

РОЗДІЛ 8. ФАРМАКОЛОГІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН

Барчук О., Студинська-Срока Е., Целецька-Пьонтек Ю., Максимович Н., Заліська О.

ВИВЧЕННЯ ТЕРАПЕВТИЧНОГО ПОТЕНЦІАЛУ ВОДНО-СПИРТОВОГО ЕКСТРАКТУ GALEGA OFFICINALIS L. У ЛІКУВАННІ ТА ПРОФІЛАКТИЦІ МЕТАБОЛІЧНИХ ЗАХВОРЮВАНЬ

127