

Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра загальної хімії
Українське товариство медичної хімії

Ministry of health of Ukraine
Ministry of education and science of Ukraine
National university of pharmacy
Pharmaceutical chemistry department
General chemistry department
Ukrainian Society of Medicinal Chemistry

MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES

Матеріали
Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,
7 листопада 2025 року

Materials
of the International Internet Conference ‘Modern chemistry of medicines’,
November 7, 2025

ХАРКІВ
KHARKIV
2025



Молекулярний докінг 4-((фуран-2-ілметил)аміно)-3,5-диметил-1-(2-арил-2-оксоетил)-1,2,4-триазолій бромідів із пептиддеформілазою бактерій

Андрій Гоцуля, Тетяна Британова*

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет
goculyats@gmail.com

Вступ. Стрімке зростання антибактеріальної резистентності сприяє формуванню значних викликів для сучасної медицини та стимулює пошук нових ефективних антимікробних агентів. У цьому контексті застосування *in silico* підходів, зокрема молекулярного докінгу, набуває особливої актуальності, оскільки дає змогу раціоналізувати процес створення біологічно активних сполук. Серед різноманіття органічних сполук особливу увагу дослідників привертають гетероциклічні системи, зокрема похідні 1,2,4-триазолу, які відомі своїм широким спектром біологічної активності. Завдяки здатності взаємодіяти з різними молекулярними мішенями ці сполуки розглядаються як перспективна основа для створення нових антимікробних засобів, здатних подолати проблему резистентності.

Метою роботи стала оцінка потенційної антимікробної активності серії 4-((фуран-2-ілметил)аміно)-3,5-диметил-1-(2-арил-2-оксоетил)-1,2,4-триазолій бромідів шляхом молекулярного докінгу до пептиддеформілази бактерій (ПДФ).

Матеріали та методи. Молекулярний докінг реалізовувався з використанням програмного забезпечення AutoDock Vina та бази даних Protein Data Bank. Структури досліджуваних сполук були змодельовані в ChemOffice (ChemDraw 2.0) та MarvinSketch 6.3.0, з наступною геометричною оптимізацією в HyperChem 8. Візуалізацію комплексів «ліганд-мішень» здійснювали у програмі Discovery Studio Visualizer з подальшим аналізом природи та типів міжмолекулярних взаємодій.

Результати та обговорення. Молекулярний докінг показав, що досліджувані 4-((фуран-2-ілметил)аміно)-3,5-диметил-1-(2-арил-2-оксоетил)-1,2,4-триазолій броміди мають високу спорідненість до активного центру ПДФ *E. coli* та *S. aureus*. Найнижчі значення енергії зв'язування виявлено для нітрозаміщених похідних, зокрема сполук із *орто*-нітрогрупою, предиктивна активність яких перевищувала еталонний інгібітор актінонін. Основними типами взаємодій у комплексах були водневі, π -катионні, π -алкільні та Ван-дер-Ваальсові зв'язки із залишками ARG, GLU, HIS, LEU та VAL. Встановлено, що такі замісники як NO₂- та OH-групи арильного фрагменту досліджуваного ряду сполук посилюють зв'язування з ферментом, тоді як OCH₃-група знижує спорідненість. Одержані результати свідчать, що нітро- та гідроксозаміщені арильні фрагменти є важливими структурними компонентами 4-((фуран-2-ілметил)аміно)-3,5-диметил-1-(2-арил-2-оксоетил)-1,2,4-триазолій бромідів, які з високою вірогідністю можуть впливати на ПДФ бактерій.

Висновки. Досліджені 4-((фуран-2-ілметил)аміно)-3,5-диметил-1-(2-арил-2-оксоетил)-1,2,4-триазолій броміди здатні утворювати стабільні комплекси з ПДФ *E. coli* та *S. aureus*, що підтверджує доцільність подальших експериментальних досліджень їх антимікробної активності.

Список літератури

1. AutoDock Vina 1.2.3: improving docking speed and accuracy with new scoring functions, efficient optimization, and multithreading [Software]. San Diego (CA): The Scripps Research Institute; 2023 [cited 2024 Oct 28]. Available from: <https://vina.scripps.edu>
2. Discovery Studio Visualizer 2021 [Software]. San Diego (CA): BIOVIA, Dassault Systèmes; 2021 [cited 2024 Oct 28]. Available from: <https://www.3ds.com/products-services/biovia>
3. ChemSketch: advanced chemical drawing and molecular modeling software [Software]. Toronto: ACD/Labs; 2023 [cited 2024 Oct 28]. Available from: <https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch>
4. PyMOL Molecular Graphics System, Version 2.5 [Software]. New York (NY): Schrödinger, LLC; 2022 [cited 2024 Oct 28]. Available from: <https://pymol.org>
5. Protein Data Bank: a worldwide repository of biomolecular structures [Internet]. Research Collaboratory for Structural Bioinformatics; 2024 [cited 2024 Oct 28]. Available from: <https://www.rcsb.org>



Синтез нової водорозчинної біологічно активної добавки з мікроелементами.....	77
Надія Антрапцева, Олена Трунова, Софія Домбровська	
Попереднє вивчення питань, які виникають при експрес-аналізі багатокомпонентних екстемпоральних лікарських форм.....	78
Юлія Бас, Крістіна Мороз, Анна Никонець, Ольга Поляк	
Екстемпоральне виробництво як шлях до ефективної персоналізованої офф-лейбл терапії.....	79
Олена Бевз, Вікторія Георгіянц	
Найбільш перспективні нові лікарські засоби: структура, механізм дії та клінічна ефективність.....	80
Дана Безик, Ольга Криванич	
Дослідження властивостей гідрофільних мазевих основ залежно від їх складу	81
Олена Безугла, Анна Ляпунова, Олексій Лисокобилка, Ігор Зінченко, Олексій Ляпунов	
Особливості кількісного визначення кобальту(II) і цинку в разі одночасної присутності в складі дієтичних добавок	82
Галина Біла, Надія Антрапцева, Артем Ткач	
Перспективи пошуку бар шляхом синтезу комплексів фенольних сполук	83
Варвара Боднарук, Олена Торлова, Джіампаоло Бароне, Лідія Петрушова, Ольга Михайленко, Вікторія Георгіянц	
Визначення речовин, що вимиваються та речовин, що екстрагуються для медичних виробів	84
Інна Бондарець, Вікторія Георгіянц	
Вивчення органічних кислот листя <i>Salix purpurea</i> 'Nana'	85
Наталія Бородіна, Дарина Кулагіна, Валентина Степанова	
Фітохімічний аналіз збору для використання у комплексної терапії та профілактиці коліту	86
Наталія Бородіна, Тетяна Угнич	
Валідація методики кількісного визначення L-триптофану та тіотриазоліну методом вискоєфективної рідинної хроматографії	87
Сергій Борсук, Людмила Кучеренко	
Металоорганічні каркаси MOF-5 як перспективні носії для лікарських засобів.....	88
Сергій Борук, Жанна Порошина	
Зв'язок хімічної структури фенольних сполук з механізмом протизапальної дії лікарських рослин	89
Олексій Бризицький, Оксана Бризицька	
Молекулярний докінг 4-((фуран-2-ілметил)аміно)-3,5-диметил- 1-(2-арил-2-оксоетил)-1,2,4-триазолій бромідів із пептиддеформілазою бактерій	90
Андрій Гоцуля, Тетяна Британова	
Дослідження сапонінів у свербіжницькій польової траві.....	91
В. Бурлака, І. Владимірова, О. Михайленко	
Дослідження умов розділення N-(4-метоксибензил)-2-(4-оксо-5,6,7,8- тетрагідро[1]бензотієно[2,3-d]піримідин-3(4H)-іл)ацетаміду з потенційними домішками методом вискоєфективної рідинної хроматографії	92
Вікторія Васильченко, Сергій Власов, Тетяна Соломінчук, Вікторія Георгіянц	