

МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ 4-ЗАМІЩЕНОГО 9,10-АНТРАХІНОНУ В ЗАЛЕЖНОСТІ ВІД РОЗРАХУНКУ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ

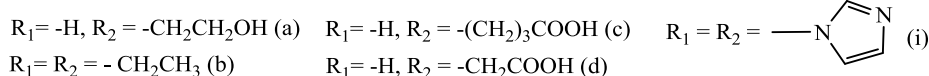
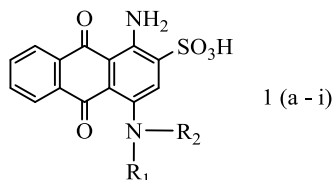
Шупенюк В. І., Тарас Т. М., Олексюк Г. І.

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника

76000, Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57

taras.tanya.if@gmail.com

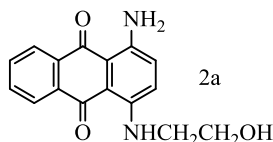
З допомогою програми PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances – прогноз спектра біологічної активності органічних сполук) спрогнозована біологічна активність синтезованих сполук 1(a-i), які були одержані нуклеофільним заміщенням бромом бромамінової кислоти.



Всі синтезовані сполуки проявляють протівірусний ефект (Antiviral). Для сполук (1a, 1c, 1d) доцільно виконати експериментальні дослідження антипротозойного (Antiprotozoal (Trypanosoma)) ефекту, а для сполук (1d, 1i) доцільність лікувального ефекту гострих неврологічних розладів (Acute neurologic disorders treatment). Сполуки (1a, 1b, 1d, 1i) можуть використовуватись, як потенційні Р2Т пуринові рецептори (Purinergetic P2T antagonist). Проте тільки похідне імідазолу 1i немає притаманних більшості барвників токсичного, тератогенного, мутагенного і канцерогенного ефектів.

Біологічна активність	Ймовірність наявності біологічної активності Pa>60 %				
	1a	1b	1c	1d	1i
Antiprotozoal (Trypanosoma)	66,2	-	70,8	78,3	-
Antiviral	84,0	84,2	82,5	83,7	71,6
Acute neurologic disorders treatment	-	-	-	64,0	64,7
Platelet aggregation stimulant	70,6	75,7	76,2	73,3	-
Purinergetic P2T antagonist	68,6	73,5	-	69,1	64,8

Відщеплення сульфогрупи було проведено $Na_2S_2O_4$ шляхом дисульфування сполуки 1a з виходом сполуки 2a – 88 %.



Згідно з результатами *in silico* прогнозування біологічної активності за програмою PASS можна зробити висновок, що сполука 2a проявляє потенційну антинеопластичну активність Pa 72,7 %, яка імовірно реалізується інгібуючою дією на ряд ферментів (Gluconate 2-dehydrogenase (acceptor), NAD(P)+-arginine ADP-ribosyltransferase, Membrane permeability) та зв'язуванням з субстратами (CYP2J, CYP2C12, UGT1A9).