

СИНТЕЗ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ПОХІДНИХ ІЗАТИНУ З АРИЛФУРАНОВИМ ФРАГМЕНТОМ

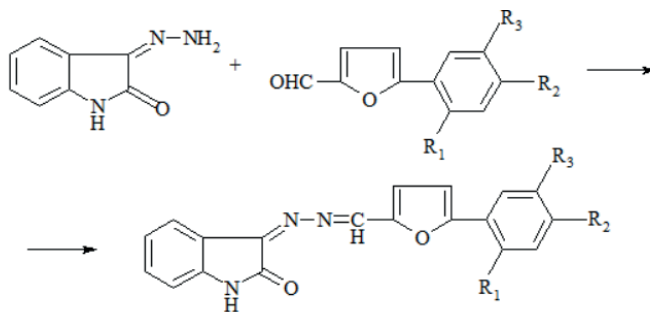
Балінов С. В., Скрипська О. В., Ягодинець П. І., Горак Ю. І.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Навчально-науковий інститут біології, хімії та біоресурсів, Чернівці, Україна

Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна
s.balinov@chnu.edu.ua

З похідних індолу протягом багатьох років найбільшу увагу привертає ізатин, оскільки ізатиновий фрагмент міститься в структурі багатьох біологічно активних речовин. Ці сполуки виявляють антимікробну, протівірусну, протитуберкульозну, антиконвульсантвну, а деякі і протиракову дію. На сьогодні декілька медичних препаратів, що містять у своїй структурі ізатиновий цикл – сунітиніб, метисазон і семаксаніб – використовують у терапевтичній практиці. Поруч з ними свою фармакофорну цінність довів арилфурановий замісник. Речовини, що його містять володіють протимікробною та протигрибковою активністю, здатні впливати на центрально-нервову систему та серцевий ритм. Звісно, більшість цих речовин було отримано за допомогою органічного синтезу.

Однією з стратегій синтезу нових біоактивних сполук є поєднання в одній молекулі двох чи більше фармакофорів. Що і було реалізовано в даній роботі. За літературними джерелами основи Шиффа синтезовані конденсацією ізатин-3-гідразону з рядом ароматичних альдегідів ймовірно виявлятимуть біологічну активність [1]. У продовження цих досліджень нами синтезовано нові азометини (**1-7**), що містять і ізатиновий, і арилфурановий фрагмент реакцією ізатин-3-гідразону з 5-арил-2-фуранкарбальдегідами в етанолі. Виходи продуктів були в межах 54 – 80 %.



1-7

R₁ = Br; R₂, R₃ = H (**1**); R₁ = Cl; R₂, R₃ = H (**2**); R₁, R₃ = H; R₂ = Cl (**3**); R₁, R₃ = Cl; R₂ = H (**4**); R₁ = Cl; R₂ = NO₂, R₃ = H (**5**); R₁ = Cl; R₂ = CF₃, R₃ = H (**6**); R₁ = OCH₃; R₂ = NO₂, R₃ = H (**7**).

Нами визначено параметри лікоподібності за допомогою програми Swiss ADME. Аналіз отриманих результатів розрахунку критеріїв лікоподібності вказує на те, що синтезовані похідні ізатину не мають відхилень від правил Ліпінські. Згідно з даними програми SUPERPred встановлено, що досліджувані сполуки можуть мати широкий спектр фармакологічної активності. Теоретично, ці речовини можуть стати основою для нових протитуберкульозних, антибактеріальних та навіть протиракових препаратів.

1. Naseer Maliyakkal, Jong Min Oh, Sunil Kumar. Synthesis, biochemistry, and in silico investigations of isatin-based hydrazone derivatives as monoamine oxidase inhibitors. *Applied Biological Chemistry*. **2024**, 64, 1-12.