

СИНТЕЗ НОВИХ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНИХ СПОЛУК НА ОСНОВІ α -АМІНОАМІДИНІВ

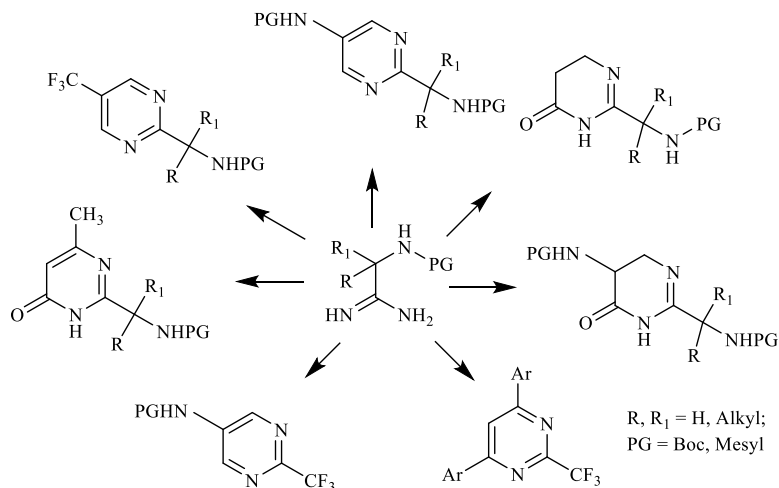
Михайлусь О. В., Гладков Є. С., Кириченко О. В.

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, Харків, Україна

oleksandra.mykhailus@student.karazin.ua

Пошук нових органічних сполук, здатних проявляти антибактеріальну або протипракову активність обумовлена поширенням таких проблем, як стійкість до антибактеріальних засобів та поява мультирезистентних штамів мікроорганізмів, а також поширення онкологічних захворювань у світі, що є проблемою глобального значення, яка спричиняє серйозні загрози людству.

З метою пошуку нових біологічно активних сполук, у продовження наших попередніх робіт [1], нами було розроблено та використано методи синтезу та отримано ряд нових похідних азотовмісних гетероциклічних сполук виходячи з α -аміноамідинів, в тому числі, таких що містять перспективні фармакофорні флуоровмісні групи та захищені реакційноздатні функціональні групи, які придатні для проведення подальшої модифікації отриманих структур – використання сполук в якості білдинг-блоків.



Структура усіх отриманих сполук була встановлена за допомогою спектральних методів аналізу – ^1H - та ^{13}C -ЯМР спектроскопії та мас-спектрометрії.

Потенційна біологічна активності, така як антимікробна та протипракова, для окремих отриманих сполук, була оцінена методами *in silico* скринінгу, молекулярного докінгу та молекулярно-динамічного моделювання з метою виявлення сполук-лідерів та оптимізації фармакофорного скарфолду.

[1] Onipko O.V., Stoianova V., Buravov O.V., Chebanov V.A., Kyrychenko A., Gladkov E.S. Synthesis of Novel Derivatives of 4,6-Diarylpyrimidines and Dihydro-Pyrimidin-4-one and *In Silico* Screening of Their Anticancer Activity. *Curr. Org. Synth.* - 2025. - Vol. 22. - 4. - P. 556 – 567.