



МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ
ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ

ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

СУЧАСНІ КОНЦЕПЦІЇ ВИКЛАДАННЯ ПРИРОДНИЧИХ ДИСЦИПЛІН В МЕДИЧНИХ ОСВІТНІХ ЗАКЛАДАХ

Матеріали
XIV Міжрегіональної науково-методичної
інтернет-конференції



14–15 грудня

Харків – 2021

Затверджено Вченою радою
Харківського національного медичного університету.
Протокол № 1 від 27.01.2022 р.

Редакційна колегія:

М'ясоєдов Валерій Васильович – голова, проректор з наукової роботи Харківського національного медичного університету, доктор мед. наук, проф. кафедри медичної біології, заслужений діяч науки і техніки України;

Краснікова Світлана Олександрівна – декан V факультету з підготовки іноземних студентів ХНМУ, канд. філол. наук, професор;

Зайцева Ольга Василівна – в.о. зав. кафедри медичної та біологічної фізики і медичної інформатики ХНМУ, д-р біол. наук, проф., заслужений професор ХНМУ;

Сирова Ганна Олегівна – зав. кафедри медичної та біоорганічної хімії ХНМУ, д-р. фарм. наук, професор;

Фоміна Людмила Володимирівна – зав. кафедри української мови, основ психології та педагогіки ХНМУ, канд. філол. наук, професор;

Мещерякова Ірина Павлівна – в. о. зав. кафедри медичної біології ХНМУ, к. мед. наук, доцент;

Батюк Лілія Василівна – доц. кафедри медичної та біологічної фізики і медичної інформатики ХНМУ, канд. біол. наук, доцент;

Човпан Ганна Олексіївна – доц. кафедри медичної та біологічної фізики і медичної інформатики ХНМУ, канд. ф.-мат. наук, доцент;

Кочарова Тетяна Ростиславівна – ст. викладач. кафедри медичної та біологічної фізики і медичної інформатики ХНМУ;

Морозова Оксана Миколаївна – ст. викладач. кафедри медичної та біологічної фізики і медичної інформатики ХНМУ.

Сучасні концепції викладання природничих дисциплін в медичних освітніх закладах: Матеріали XIV Міжрегіональної науково-методичної інтернет-конференції, 14–15 грудня 2021 р., м. Харків. – Харків : ХНМУ, 2021. – 258 с.

У збірнику представлено матеріали більш ніж 100 фахівців та молодих науковців закладів вищої освіти. Доповіді присвячено проблематиці викладання природничих дисциплін в медичних освітніх закладах. Наукове видання рекомендовано науково-педагогічним працівникам, які працюють у закладах вищої освіти, докторантам, аспірантам, магістрантам, студентам, а також широкому колу читачів, які цікавляться проблемами університетської освіти.

Секція № 2
ХІМІКО-ФАРМАЦЕВТИЧНІ НАУКИ

ОСОБЛИВОСТІ ВИКЛАДАННЯ ТОКСИКОЛОГІЧНОЇ ХІМІЇ ДЛЯ ЗДОБУВАЧІВ ВИЩОЇ ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ ОСВІТИ <i>Карпушина С. А., Баярка С. В.</i>	96
АНАЛІЗ ФАРМАЦЕВТИЧНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ АНТИГІСТАМІННИМИ ЛІКАРСЬКИМИ ЗАСОБАМИ ПРИ ЛІКУВАННІ АЛЕРГІЧНОГО РИНИТУ <i>Лебедин А. М., Ковенько Н. Ф.</i>	99
ОЦІНКА ВИКОРИСТАННЯ DIGITAL-КОМУНІКАЦІЙ В НАВЧАЛЬНОМУ ПРОЦЕСІ ПІД ЧАС ПАНДЕМІЇ <i>Овчаренко О.О., Пестун І.В., Кобець М.М., Кобець Ю.М.</i>	101
ЗАВДАННЯ ВИКЛАДАННЯ ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ ХІМІЇ ДЛЯ СТУДЕНТІВ- ФАРМАЦЕВТІВ <i>Рахімова М. В., Сич І. А., Яременко В. Д., Перехода Л. О.</i>	104
МЕТОДИКА ВИКЛАДАННЯ ТЕМИ «ФІЗИКО-ХІМІЯ ДИСПЕРСНИХ СИСТЕМ» У КУРСІ ФІЗИЧНОЇ ТА КОЛОЇДНОЇ ХІМІЇ ДЛЯ ОСВІТНЬОЇ ПРОГРАМИ «ФАРМАЦІЯ. ПРОМИСЛОВА ФАРМАЦІЯ» <i>Томаровська Т. О., Сердюкова Ю. Ю.</i>	107
БІОМЕДИЧНІ ЗАСТОСУВАННЯ МАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК ЯК КОНТРАСНИХ АГЕНТІВ <i>Чан Т. М., Шейкіна Н. В., Козачок А. А., Яременко В. В.</i>	111
ПОВЕДІНКА МАГНІТОКЕРОВАНИХ НАНОКОМПЗИТІВ У МАГНІТООПТИЧНИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ <i>Шейкіна Н. В., Чан Т. М.</i>	114
ПРОБЛЕМИ ВИВЧЕННЯ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН У СТУДЕНТІВ МЕДИЧНИХ СПЕЦІАЛЬНОСТЕЙ ЯКІ ВСТУПАЮТЬ ВИШУ НА ОСНОВІ ДИПЛОМА МОЛОДШЕГО СПЕЦІАЛІСТА <i>Шолух Н. Є., Парамонова Г. О.</i>	118
THE SELECTION OF SWEETENERS IN THE COMPOSITION OF LOZENGES TO PROMOTE SMOKING CESSATION <i>B. A. Adler, Yu. S. Maslii</i>	120
TESTING OF 9-(R-BENZYLIDENE)HYDRAZINO-5-NITROACRIDINES FOR COMPLIANCE WITH LIPINSKI'S «RULE OF FIVE» <i>Y. Haity, H. O. Yeromina, K. P. Romas, Z. G. Ieromina</i>	122

UDC 547:54.05

Youness Haity, H. O. Yeromina, K. P. Romas, Z. G. Ieromina
National University of Pharmacy
Kharkiv, Ukraine

TESTING OF 9-(R-BENZYLIDENE)HYDRAZINO-5-NITROACRIDINES FOR COMPLIANCE WITH LIPINSKI'S «RULE OF FIVE»

Introduction. Acridine derivatives have been extensively explored as potential therapeutic agents for the treatment of a number of diseases, such as cancer, Alzheimer's, and bacterial and protozoan infections. Their mode of action is mainly attributed to DNA intercalation and the subsequent effects on the biological processes linked to DNA and its related enzymes.

Drug discovery and development is a very complex and costly endeavor, which includes disease selection, target identification and validation, lead discovery and optimization, preclinical and clinical trials.

An ideal drug molecule would comply with the physicochemical property guidelines of Lipinski's Rule of Five (RO5) [1, c. 3-26]. It predicts the drug likeness of a chemical compound with a certain biological activity designed for oral route of administration. According to the RO5, a *drug-like* compound should have a molecular weight (MW) of <500 g/mol, a log p value of <5 representing its hydrophobicity, no >5 hydrogen bond donors (HBDs), and no >10 hydrogen bond acceptor (HBA) sites. Further research has added two more conditions: a polar surface area (PSA) of <140 Å² and <10 rotatable bonds (Rot B) [2, c. 2617; 3, c. 392], which are correlated with drug permeability and flexibility, respectively (Fig. 1).

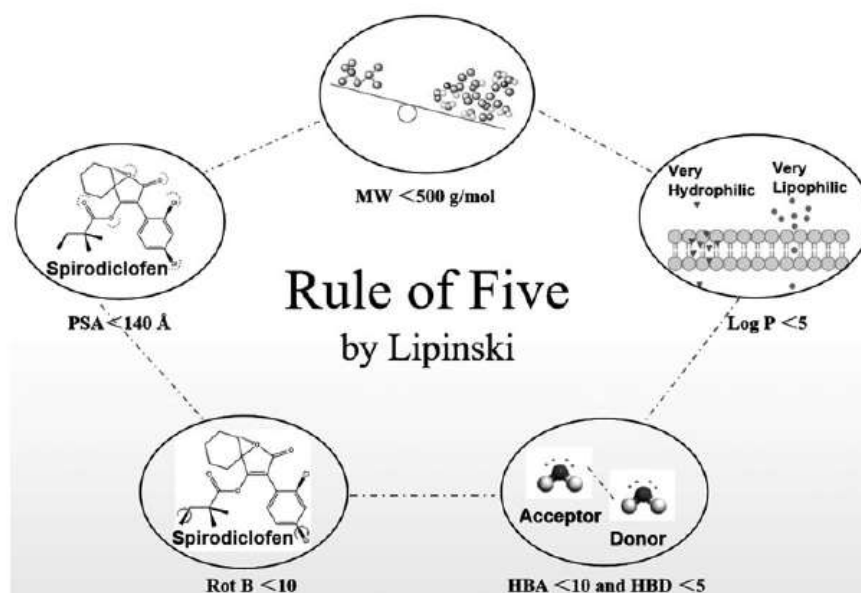
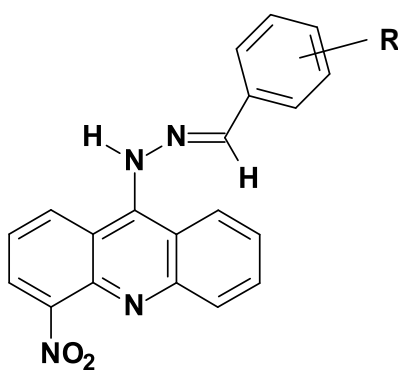


Fig. 1. Visual scheme of the Rule of Five criteria: molecular weight (MW), polar surface area (PSA), rotatable bonds (Rot B), hydrogen bond acceptors (HBAs), hydrogen bond donors (HBDs), log P

If a compound meets the five principles, then it will have enhanced pharmacokinetic properties and increased bioavailability in the metabolic process of the organism.

The purpose of present work is to test of 9-(R-benzylidene)hydrazino-5-nitroacridines **1-4** (Fig. 2) for compliance with lipinski's «Rule of five».



, where

1. R=2-NO₂; 2. R=4-NO₂; 3. R=2-OCH₃; 4. R=4-OCH₃

Fig. 2

Materials and methods. A number of average values of physicochemical parameters that determine the bioavailability of the tested 9-(R-benzylidene)hydrazino-5-nitroacridines **1-4** were calculated using computer programs ACD/Labs and Molinspiration and are compared with the optimal and maximum allowable according to the Lipinski's RO5. Molecular weight, molar refraction, number of hydrogen bond donors and acceptors were calculated using Molinspiration, and the partition coefficient was calculated using ACD/Labs.

Results obtained. Analysis of the results showed that all test compounds did not deviate from the Lipinski's RO5, ie the average values of physicochemical parameters of the compounds are close to optimal, and this, according to the Lipinski's RO5, should ensure good bioavailability of the substance when taken orally.

Conclusions. According to the test results, 9-(R-benzylidene)hydrazino-5-nitroacridines **1-4** have *drug-like* properties and can be recommended for experimental pharmacological studies.

References

1. Lipinski, C.A., Lombardo, F., Dominy, B.W., et al. 2001. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings. *Adv. Drug Deliver. Rev.* 46, 3–26.
2. Veber, D.F., Johnson, S.R., Cheng, H.-Y., et al. 2002. Molecular properties that influence the oral bioavailability of drug candidates. *J. Med. Chem.* 45, 2615–2623.
3. Huang, H., Chu C.L., Chen L., et al. 2019. Evaluation of potential inhibitors of squalene synthase based on virtual screening and in vitro studies. *Comput. Biol. Chem.* 80, 390–397.