

**Алгоритм створення нових біологічно активних сполук
серед похідних тіосечовини**

Єрьоміна Г. О., Саїді О. Л., Кізь О. В., Єрьоміна З. Г.

Кафедра медичної хімії

Національний фармацевтичний університет

м Харків, Україна

annerem2012@gmail.com

Серед лікарських препаратів, що найбільш часто застосовуються в медицині, важливе місце займають антимікробні препарати. Наявна в даний час номенклатура антимікробних засобів вимагає постійного оновлення, що в першу чергу обумовлено зростаючою резистентністю збудників інфекційних захворювань до хіміотерапевтичних засобів.

Мета нашої роботи – розробка дизайну дослідження зі створення перспективних антимікробних засобів серед похідних тіосечовини. Базовими структурами обрано N-морфолінзаміщені тіосечовини [1, 2].

Одним із початкових етапів у дизайні дослідження стало використання комп'ютерної програми PASS-online для прогнозування біологічної активності нових похідних тіосечовини та відбір молекул, які з індексом вірогідності наявності активності $P_a \geq 0.50$ проявляють бажану активність. Наступним етапом був підбір оптимальних умов для синтезу відібраних молекул. Після доведення хімічної структури та підтвердження чистоти синтезованих сполук, в Інституті мікробіології та імунології імені І. І. Мечникова проведено фармакологічний скринінг на антимікробну активність методом дифузії сполуки в агар «колодязями». Відповідно до рекомендацій ВООЗ для оцінки активності препаратів використовували грампозитивні та грамнегативні тест-штами мікроорганізмів: *Escherichia coli* ATCC 25922, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853, *Proteus vulgaris* ATCC 4636. Одержані результати фармакологічного скринінгу свідчать, що всі досліджувані мікроорганізми чутливі до тестованих сполук (середній діаметр зон затримки росту 21 мм).

Результати проведеного експерименту підтверджують ефективність алгоритму пошуку сполук з антимікробною дією серед N-морфолінзаміщених тіосечовин. Дослідження в даному напрямку продовжуються.

Література: 1. Bayrak H., Demirbas A., Demirbas N., Alpay Karaoglu S. Cyclization of some carbothioamide derivatives containing antipyrine and triazole moieties and investigation of their antimicrobial activities. *Eur. J. Med. Chem.* 2010. Vol. 45. P. 4726–4732.

2. Вартамян С. О. Синтез и изучение антибактериальных свойств новых дизамещенных производных тиомочевини / С. О. Вартамян, А. Б. Саргсян, А. С. Авакян и др. *Хим журн Армении.* 2015. Т. 68. №2. С. 251-258.