

## Синтез і *drug-like* характеристики нового похідного 1,3-тіазолу

Приходько К.С., Єрьоміна З.Г., Єрьоміна Г.О.

Національний фармацевтичний університет,

Кафедра медичної хімії

(м. Харків, Україна)

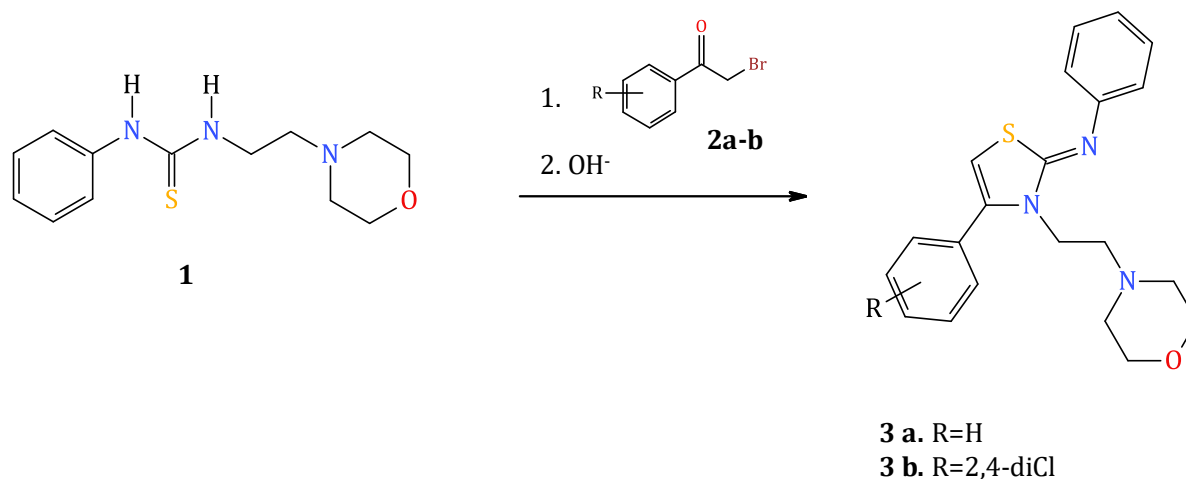
annerem2012@gmail.com

Сьогодні вивчення зв'язку біологічної активності і структури хімічних сполук, а також пошук на цій основі нових високоактивних лікарських речовин є фундаментальною задачею, що має важливе значення для сучасної фармакології. Зважаючи на те, що неможливо здійснити експериментальні дослідження нових речовин на всі відомі види активності, а розробка нової лікарської субстанції триває більше 15 років і вимагає колосальних затрат [1], все частіше початковим етапом пошуку біологічно активних речовин стає використання доекспериментальних методів *in silico*, що передують експериментальним методам *in vitro* і *in vivo*. Серед напрямків такого скринінгу варто виокремити використання лікоподібних (*drug-like*) характеристик для пошуку нових потенційних кандидатів у лікарську субстанцію [2].

Актуальним є створення нових біологічно активних речовин антибактеріальної та антигрибкової дії, оскільки глобальною проблемою є стійкість до протимікробних препаратів. Це потребує термінового вирішення. За останні 20 років розвиток і поширення стійких мікроорганізмів значно прискорилися. Цьому сприяло зростання числа інфекцій, поява стійких до лікування «суперінфекцій» та розповсюдження інфекцій від людини до людини [3].

З метою пошуку речовин антибактеріальної та антигрибкової дії на кафедрі медичної хімії НФаУ синтезовано нові похідні 1,3-тіазолу за реакцією Ганча відповідно до Схеми:

Схема



У результаті проведення *in silico* досліджень синтезованих сполук встановлено наявність у них *drug-like* характеристик, що є підґрунтям для подальшого їх дослідження у дослідах *in vitro* та *in vivo* на наявність антибактеріальної та антигрибкової активності.

### Література:

1. Г. Кубиньї. Рос. хим. журн. 2006. №2. С. 5–17.
2. Lipinski C.A., Lombardo F., Dominy B.W., Feeney P.J. Adv. Drug Del. Rev. 2001. Vol. 46, № 1-3. – P. 3–26.
3. Стійкість до протимікробних препаратів та її глобальне поширення. 2020.