

Одержані результати. Частинки магнетиту синтезували шляхом спільного осадження солей феруму (II) та (III) у середовищі амоній гідроксиду. Використовуючи структуру магнетиту $\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_4$ як базову, проводили заміщення катіону феруму (II) іншим катіоном двовалентного металу (M), що дало можливість одержати повністю $\text{M}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_4$ або частково заміщені магнетити $\text{M}_x\text{Fe}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$. Багатокомпонентна феритова частинка в цьому випадку є джерелом не тільки феруму, але й інших мікроелементів, що забезпечує синергетичність їх дії.

Повна заміна іонів Fe^{2+} у структурі магнетиту іншими двовалентними катіонами при синтезі феритів шляхом хімічної конденсації веде до уповільнення старіння осаду та необхідності його прожарювання для завершення процесу феритизації (утворення кристалічної ґратки та набуття магнітних властивостей). Встановлено, що одержання повністю заміщених частинок магнетиту типу шпінелі з катіонами Cu^{2+} , Mn^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , а також частинок гексафериту (містить Ba^{2+}) може здійснюватися у два етапи: спільне осадження у лужному середовищі та високотемпературне спікання продуктів спільного осадження. Синтез високодисперсних частинок частково заміщеного магнетиту шпінельного типу проводили з використанням катіонів цинку та двовалентних катіонів тріади феруму. Часткова заміна катіонів феруму (II) дозволяє здійснювати синтез магнітних частинок в одну стадію без додаткової високотемпературної феритизації. Частинки, синтезовані за цією схемою, мають розмір до 20–30 нм і вище значення магнітних властивостей. При вивченні функціональних параметрів синтезованих феритів вивчено характер залежності його властивостей від вмісту катіону-замісника в структурі.

Висновки. У результаті проведених досліджень обґрунтована універсальна методологія синтезу частково заміщених частинок магнетиту типу шпінелі $\text{M}_x\text{Fe}_3\text{O}_4$ і показана доцільність введення замісного катіону з концентрацією 40 % для ефективних змін функціональних властивостей синтезованих структур. Встановлена комбінація високих функціональних характеристик синтезованих частинок феритів – висока намагніченість та розмір частинок, що дозволяє використовувати ці частинки у магнітокерованих лікарських засобах.

ПРОГНОЗУВАННЯ ПЕРСПЕКТИВ ПРОТИМІКРОБНОЇ АКТИВНОСТІ ЗАМІЩЕНИХ 2-ПІРИДИЛ АМІДІВ

ТІЄНО[2,3-*d*]ПІРИМІДИН-4-КАРБОНОВИХ КИСЛОТ

Власова О.Д., Власов С.В., Кабачний В.І., Северіна Г.І.

Національний фармацевтичний університет, Харків, Україна

sergiy.vlasov@gmail.com

Вступ. На фоні зростаючої резистентності патогенних мікроорганізмів до існуючих антибіотиків, доцільним є проведення цілеспрямованих досліджень по конструюванню лігандів до відкритих нещодавно мішеней, які обумовлюють протимікробну дію за новими молекулярними механізмами. Одним із таких ензимів, які досліджені у роботах останніх часів є tRNA (guanine37- N^1)-methyltransferase (EC2.1.1.228; TrmD), що є ключовим ферментом для виживання бактерій (у тому числі *P. aeruginosa*) у момент стресу.

Мета дослідження. Перевірка гіпотези, щодо доцільності синтезу 2-піридил амідів тієно[2,3-*d*]піримідин-4-карбонівих кислот з метою подальшого дослідження їх протимікробної активності для конструювання нового класу антибіотиків.

Матеріали та методи. Програмні продукти: ISISDraw 2.3, Discovery studio Visualizer 4.0, Python molecule viewer та Autodock Vina. Докінгові дослідження проводили на моделях гнучких лігандів та жорсткої молекули протеїну. Кристалографічні дані для ферментів PaTrmDc *P. aeruginosa* (5ZHN) отримано із Protein Data Bank (<http://www.rcsb.org/pdb>).

Отримані результати. Для набору замісників у положеннях 5 та 6 тієно[2,3-*d*]піримідин (5,6-diMe; 5,6-(CH₂)₄-; 5,6-(CH₂)₅-) методом молекулярного докінгу здійснено прогноз, щодо доцільності ведення замішених 2-піридилних фрагментів, як амідних до карбонільної групи в положенні 4. Встановлено, що поява 2-піридилних фрагментів з метильованими положеннями 5 або 4 може сприяти зв'язуванню з активним сайтом tRNA (guanine37-N¹)-methyltransferase.

Висновки. Докінгові дослідження віртуальних структур, а саме 2-піридил амідів тієно[2,3-*d*]піримідин-4-карбонових кислот по відношенню PaTrmDc, ізольованої з *P. aeruginosa* (5ZHN) показали раціональність їх синтезу і дослідження у якості протимікробних агентів.

Фінансування. Дослідження фінансується Міністерством охорони здоров'я України за рахунок державного бюджету в рамках програми № 2301020 «Наукова та науково-технічна діяльність у галузі охорони здоров'я» за темою «Синтез та дослідження нових тієнопіримідинів для виявлення антимікробних та супутніх видів фармакологічної активності» (Наказ МОЗ України від 17 листопада 2020 № 2651).

КАРБОЦИКЛІЧНІ ПОХІДНІ АМІНОПРОПНОЛУ-2 З АНТИВІРУСНОЮ АКТИВНІСТЮ ТА ЇХ ДІЯ НА КОРОНАВІРУС ТРАНСМІСИВНОГО ГАСТРОЕНТЕРИТУ СВИНЕЙ

Волощук О.М.¹, Короткий Ю.В.², Рибалко С.Л.³, Широбоков В.П.¹,
Архіпова М.А.³, Старосила Д.Б.³, Дерябін О.Н.³

¹Кафедра мікробіології, вірусології та імунології НМУ імені О.О. Богомольця, Київ, Україна

²Інститут органічної хімії НАН України, Київ, Україна

³Лабораторія експериментальної хіміотерапії вірусних інфекцій ДУ Інституту епідеміології та інфекційних хвороб ім. Л.В. Громашевського НАМНУ, Київ, Україна

poshta_omv@ukr.net

Вступ. Пандемія COVID-19 спричинила, та продовжує спричинювати великі людські та економічні втрати у всіх регіонах світу. Для лікування COVID-19 ВООЗ рекомендує деякі відомі препарати - ремдесівір, лопінавір, хлорохін та ін. Однак, на сьогодні не існує клінічно переконливих даних щодо терапевтичної ефективності названих препаратів при COVID-19. Отже пошук, та створення ефективних і безпечних противірусних засобів для специфічної терапії COVID-19 залишається нагальною потребою сьогодення.

Мета дослідження. Метою нашого дослідження було визначити антивірусну активність ряду карбоциклічних похідних амінопропанолу-2, синтезованих в Інституті органічної хімії НАН України щодо вірусу родини *Coronaviridae*.

Матеріали та методи. Досліджувані речовини містили різні замісники в алкоксигрупі: адамантилвмісні (сполуки № 5 та №10), циклічні радикали (сполука № 30), аліциклічні радикали (сполуки №№ 33, 40, 46, 50, 52, 53). Антивірусний потенціал цих речовин було продемонстровано в наших попередніх дослідженнях з використанням комп'ютерної