

виводиться нирками з організму протягом 24 годин. Сполука витримує високі температури і тому може використовуватися у виробництві продуктів, які піддаються інтенсивній термічній обробці, включаючи стерилізацію.

Наведені приклади органічних речовин, які призначені для надання солодкого смаку продуктам без додавання калорій, мають як переваги так і недоліки.

Однією з головних переваг використання синтетичних замінників цукру є їхня низька калорійність. Це особливо важливо для тих, хто стежить за своєю вагою та здоров'ям. Можливість отримувати солодкий смак, не накопичуючи зайві калорії, стає важливою альтернативою традиційному цукру. Ще однією перевагою є те, що синтетичні замінники цукру рекомендовано людям, хворим на діабет. Багато з цих замінників не впливають на рівень глюкози в крові, вони дозволяють людям, які мають цю хворобу, насолоджуватися солодким без ризику підвищення цукру в організмі. Крім того, замінники цукру можуть сприяти зменшенню ризику карієсу. Оскільки вони не піддаються розкладанню бактеріями в ротовій порожнині, що стимулює ріст карієс-сприятливих мікроорганізмів, це може мати позитивний ефект на стан зубів.

Проте, разом з перевагами, синтетичні замінники цукру мають і свої недоліки. По-перше, деякі з них можуть викликати алергічні реакції та індивідуальні несприйняття. Реакція на синтетичні речовини може бути різною для кожної людини, і важливо враховувати цей аспект. Також, замінники цукру можуть мати специфічний смак або післясмак, який може не влаштовувати всіх споживачів. Це може впливати на вживання продуктів, що містять ці замінники.

Висновки. У підсумку варто сказати, що обираючи синтетичні замінники цукру, важливо дотримуватися рекомендацій щодо безпечного споживання та враховувати індивідуальні особливості організму. Вибір використання цукрозамінників або відмова від них повинні базуватися на особистих потребах, фізіологічних характеристиках та порад лікаря.

PREDICTION OF METABOLIC DIRECTIONS OF 2-METHYL-3-[(4-METHYLANILINO)METHYL]-1H-QUINOLIN-4-ONE – A POTENTIAL API WITH NOOTROPIC ACTION

Kolishnischenko A.V.

Scientific supervisor: Podolsky I.M.

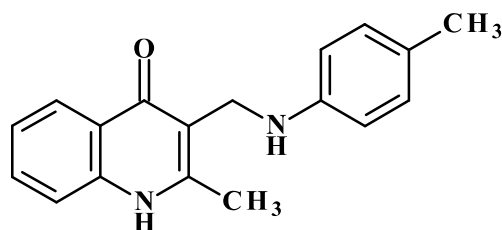
National University of Pharmacy, Kharkiv, Ukraine
medchem@nuph.edu.ua

Introduction. Because undesirable pharmacokinetics and toxicity are significant reasons for the failure of drug development in the costly late stage, it has been widely recognized that drug ADMET properties should be considered as early as possible to reduce failure rates in the clinical phase of drug discovery. Concurrently, drug recalls have become increasingly common in recent years, prompting pharmaceutical companies to increase attention toward the safety evaluation of preclinical drugs. *In vitro* and *in vivo* drug evaluation techniques are currently more mature in preclinical applications, but these technologies are costly. In recent years, with the rapid development of computer science, *in silico* technology has been widely used to evaluate the relevant properties of drugs in the preclinical stage and has produced many software programs and *in silico* models, further promoting the study of ADMET *in vitro*. That is why the use of computer-aided prediction of probable

metabolic pathways of a potential drug candidate at the early stages is an effective approach that allows us to identify metabolic sites, predict the structures of the metabolites formed, the intensity of metabolism and the specificity of substrates to cytochrome P450 enzymes.

Aim. Prediction of probable metabolic pathways of 2-methyl-3-[(4-methylanilino)methyl]-1H-quinolin-4-one as a promising candidate for APIs with nootropic properties.

Materials and methods. The object of the study is 2-methyl-3-[(4-methylanilino)methyl]-1H-quinolin-4-one (figure), synthesized by Vadym Zubkov, Associate Professor of the Department of Medicinal Chemistry.



The investigated molecule became a promising object for pharmacological study based on the results of a comprehensive screening study of its psycho- and neurotropic properties carried out by Illya Podolsky, Professor of the Department of Medicinal Chemistry.

In order to predict the possible pathways of biotransformation of 2-methyl-3-[(4-methylanilino)methyl]-1H-quinolin-4-one, five different online resources that are freely available were used, namely: Xenosite, SMARTCyp, Way2Drug RA, Biotransformer, and GLORYx.

Research results. A comprehensive analysis of the results of predicting the possible metabolic pathways of 2-methyl-3-[(4-methylanilino)methyl]-1H-quinolin-4-one using five different online systems leads to the conclusion that the molecule can be intensively metabolized by cytochrome P450 enzymes. The main directions can be considered aromatic hydroxylation of the test substance molecule with the participation of carbon atoms of both the quinolone heterocyclic system and the phenyl substituent, as well as N-dealkylation of the aminomethyl fragment. In this case, the predicted metabolites are unlikely to significantly affect the overall pharmacological activity profile of the parent molecule. However, the possible directions of aliphatic hydroxylation, especially at the methyl group at position 2 of the heterocycle, to kynurenic acid derivatives, suggest that the proven pharmacodynamic effects of the test molecule may be at least partially provided by these pharmacologically active metabolites.

Conclusions. Using five different online resources that are freely available, a computer prediction of possible pathways of biotransformation of a promising compound, 2-methyl-3-[(4-methylanilino)methyl]-1H-quinolin-4-one, was performed. The general regularities of metabolic transformations of the test molecule completely coincide and fit into the current views of medicinal chemistry on the reactivity of xenobiotics under the influence of cytochrome P450 enzymes in the human body.