ЦЕЛЕНАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ АЗОМЕТИНОВ 2-АМИНО-ТЕТРАГИДРО-БЕНЗОТИОФЕН-3-КАРБОКСАМИДА, ВЛИЯЮЩИХ НА ЦОГ-2

**А.С. Чиряпкин¹, И.П. Кодониди¹, А.В. Ивченко¹, Л.П. Смирнова¹,
М.В. Ларский²**

¹Кафедра органической химии, Пятигорский медико-фармацевтический институт – филиал
ФГБОУ ВО «ВолГМУ» Министерства здравоохранения Российской Федерации,
357532, Россия, г. Пятигорск, пр. Калинина, д. 11.

²Кафедра фармацевтической химии, Пятигорский медико-фармацевтический институт
– филиал ФГБОУ ВО «ВолГМУ» Министерства здравоохранения Российской Федерации,
357532, Россия, г. Пятигорск, пр. Калинина, д. 11.

DOI: 10.19163/MedChemRussia2021-2021-524

E-mail: alexey.chiriapkin@yandex.ru

Предварительный прогноз противовоспалительной активности осуществлялся посредством молекулярного докинга с использованием трехмерной структуры ЦОГ-2 из базы данных RCSB Protein Data Bank (rcsb.org) с идентификационным номером 2IKT [1] в программе Autodock 4.0 [2]. Изучено образование 14 комплексов моделируемых азометинов с активным сайтом ЦОГ-2. Данные докинга свидетельствуют о высоком сродстве к белковой мишени азометиновых производных 2-амино-4,5,6,7-тетрагидро-1-бензотиофен-3-карбоксамида в случае наличия в ароматических заместителях атомов галогенов. Далее осуществлен синтез наиболее перспективных соединений, который проводили путем взаимодействия 4,5,6,7-тетрагидро-1-бензотиофен-3-карбоксамида с ароматическими альдегидами в среде этанола при кипячении в течение 30–60 минут. Данные ЯМР спектроскопии подтвердили структуры полученных азометинов. На рисунке показано расположение соединения-лидера с R = 2-OH-3-OCH₃-5-Br в активном сайте ЦОГ-2 по результатам молекулярного докинга.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного
проекта № 20-315-90060.*

Литература

- [1] Orlando, B.J, Malkowski, M.G., J Biol Chem. 2016, 291:15069-15081.
- [2] Morris G.M., Huey R., Lindstrom W., Sanner M.F., Belew R.K., Goodsell D.S., Olson A.J.
Journal of Computational Chemistry. 2009, 30(16):2785–2791.