СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СПЕКТРОВ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ И ЦИТОТОКСИЧНОСТИ БИСТИАДИАЗОЛОВ

Ю.В. Суворова, Е.А. Петухова, Е.А. Данилова

НИИ Макрогетероциклических соединений,
Ивановский государственный химико-технологический университет,
153000, Россия, Иваново, Шереметевский проспект, 7.

DOI: 10.19163/MedChemRussia2021-2021-539

E-mail: yuliya_butina@mail.ru

Целью данной работы является поиск новых препаратов, обладающих фармакологической активностью, на основе двухъядерных гетероциклических соединений, содержащих два 1,3,4-тиадиазольных цикла, связанных различными спейсерами.

В качестве объектов исследования нами выбраны и синтезированы по методике, описанной ранее в литературе [1], бис(1,3,4-тиадиазол)амины, содержащие метиленовый, этиленовый, пропиленовый, бутиленовый, пентиленовый и этениленовый спейсеры. Полученные соединения идентифицированы данными ИК, ЯМР спектроскопии и масс-спектрометрии.

Прогноз спектров антибактериальной и других видов активности, а также цитотоксичности был выполнен с использованием программ *Anti-Bac-Pred*, *PASS* и *CLC-Pred*, находящихся в свободном доступе в сети Интернет [2], и показал целесообразность биотестирования полученных молекул на некоторые виды активности.

Для оценки применения данных *in silico* нами проведен эксперимент *in vitro*, который показал, однако, что синтезированные соединения не активны против штаммов бактерий *Pseudomonas aeruginosae*, *Escherichia coli* и *Staphylococcus aureus*. Другие виды активности полученных веществ в настоящее время изучаются.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ
МК-1396.2020.3.*

References

- [1] Ю.В. Суворова, Е.А. Петухова, Е.А. Данилова, Д.В. Тюрин, Жидк. крист. и их практич. использ., 2020, 20(4), 41–48.
- [2] D.A. Filimonov, D.S. Druzhilovskiy, A.A. Lagunin, T.A. Glorizova, A.V. Rudik, A.V. Dmitriev, P.V. Pogodin, V.V. Poroikov, Biomed. Chem. Res. Meth. 2018, 1(1), 1–21.