

---

**ВЕСНЯНА СТУДЕНТСЬКА НАУКОВА СЕСІЯ – 2024**  
**SPRING STUDENT’S SCIENTIFIC SESSION – 2024**



**Квітень 22-26, 2024 Київ, Україна**  
**April 22-26, 2024 Kyiv, Ukraine**

---

---

**КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ  
МАЛИХ СИНТЕТИЧНИХ МОЛЕКУЛ  
НА ОСНОВІ ІМІДАЗО[1,2-А]ПІРИДИНУ  
ТА ПІРИМІДИНУ  
ЯК ПОТЕНЦІЙНИХ МОЛЕКУЛ-КАНДИДАТІВ У ЛІКАРСЬКІ ЗАСОБИ**

*Погоріла Ю. О.*

*Науковий керівник: к.фарм.н., доцент Мацькевич К. В.*

*Кафедра: хімії ліків та лікарської токсикології*

*Завідувач кафедри: д.мед.н., професор Ніженковська І. В.*

*Національний медичний університет імені О. О. Богомольця*

*м. Київ, Україна*

**Актуальність:** зростаюча потреба в більш ефективних та менш токсичних лікарських засобах для лікування захворювань, таких як онкології, інфекційні хвороби та неврологічні стани, вимагає пошуку нових підходів. Синтетичні малі молекули, зокрема ті, що є похідними імідазо[1,2-а]піридину та піримідину, наразі розглядаються як потенційні кандидати для розробки нових лікарських засобів, оскільки вони можуть виявити високу активність та селективність до конкретних біологічних мішеней. Використання квантово-хімічних методів дозволяє досліджувати взаємодію цих молекул з біологічними макромолекулами, прогнозувати біологічну активність та властивості даних сполук, відкриваючи можливості для раціонального дизайну нових лікарських засобів. Дослідження в області квантово-хімічних властивостей малих синтетичних молекул на основі імідазо[1,2-а]піридину та піримідину має великий потенціал для вдосконалення подальшого розуміння структурно-активних взаємодій та сприятиме розробці нових лікарських засобів з покращеними характеристиками.

**Мета роботи:** дослідити придатність до лікарських засобів та імовірні фармакофори похідних імідазо[1,2-а]піридину та піримідину за квантово-хімічними параметрами.

**Методи дослідження:** для дослідження були використані розрахункові квантово-хімічні методи на базі онлайн програм для комп'ютерного моделювання *in silico*, зокрема SwissTargetPrediction, way2drug, Lazar.

**Результати:** у результаті досліджень встановлено, що фармакофором у фосфорильованих похідних імідазо[1,2-а]піридину та піримідину є фосфонатна група. Дана група проявляє високу афінність до мішеневих білків та сприяє збільшенню біологічної активності досліджуваних сполук. Виявлення даного фармакофора відкриває можливості для подальшого раціонального дизайну та оптимізації молекул з метою розробки нових потенційних лікарських засобів на основі досліджуваних малих синтетичних молекул.

Водночас результати проведених розрахунків підтвердили, що дані сполуки виявляють високий ступінь спорідненості до лікарських засобів відповідно до правил Ліпінського, Чоуза, Вебера та Егана. Це підтверджує їхню потенційну ефективність та можливість використання у розробці нових медикаментів. Врахування даних правил у процесі дизайну молекул може сприяти покращенню їхніх лікарських властивостей та більш успішній інтеграції в клінічну практику.

**Висновки:** малі синтетичні молекули на основі фосфорильованих похідних імідазо[1,2-а]піридину та піримідину мають високу спорідненість до лікарських засобів згідно з основними правилами молекулярного дизайну, що свідчить про їхнє можливе клінічне застосування. Дані результати відкривають перспективи для подальшого дослідження та оптимізації цих молекул з метою розробки нових ефективних лікарських препаратів.

**Ключові слова:** похідні імідазо[1,2-а]піридину, похідні імідазо[1,2-а]піримідину, малі синтетичні молекули, нові лікарські засоби.

## Список авторів

VI УКРАЇНО-ПОЛЬСЬКИЙ КОНГРЕС  
«ІННОВАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ОТОРИНОЛАРИНГОЛОГІЇ»

VI UKRAINIAN-POLISH CONGRESS  
«INNOVATIVE TECHNOLOGIES IN OTORHINOLARYNGOLOGY»  
19-20 квітня 2024 року / April 19-20, 2024

XVI НАУКОВО ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ МОЛОДИХ ВЧЕНИХ  
З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ  
«СПЕЦІАЛЬНІ ПИТАННЯ ДІАГНОСТИКИ ТА ЛІКУВАННЯ ЗАХВОРИВАНЬ  
ЛОП-ОРГАНІВ, КРАНІОФАСЦІАЛЬНОЇ ДІЛЯНКИ ТА ОРГАНУ ЗОРУ»

XVI SCIENTIFIC AND PRACTICAL CONFERENCE OF YOUNG SCIENTISTS WITH  
INTERNATIONAL PARTICIPATION  
«SPECIAL ISSUES OF DIAGNOSIS AND TREATMENT OF  
ENT ORGANS, CRANIOFASCIAL AREA AND THE ORGAN OF VISION DISEASES»  
19 квітня 2024 року / April 19, 2024

Александрук Н.В. ....	6	Дзиза А.В. ....	21, 23, 37	Kovalenko S.O. ....	46
Андреев О.В. ....	7	Лупир А.В. ....	21, 22, 23	Гатальська Є.О. ....	47
Тагунова І.К. ....	7	Карчинський О.О. ....	22	Маланчук В.О. ....	47
Гуца С.Г. ....	7	Ященко М.І. ....	23	Дзюба А.О. ....	48
Богданов К.Г. ....	7	Дьоміна Є.В. ....	23	Біль Б.Н. ....	48
Бур'ян О.В. ....	8	Паламарчук В.В. ....	25	Дишлюк С.О. ....	49
Змеєв В.О. ....	8	Пухлік С.М. ....	26, 27	Дорожовська Х.І. ....	50
Юревич Н.О. ....	8, 21	Тігаренко О.В. ....	27	Бучко О.І. ....	50
Герасимюк М.І. ....	9	Тинітовська О.І. ....	28	Кіреєва Д.О. ....	51
Герц В.Д. ....	10, 18	Цвірінко І. ....	29, 91	Ковальова А.М. ....	52
Кізім В.В. ....	10, 18	Нестерчук В. ....	29	Коломієць Н.А. ....	53
Толчинський В.В. ....	10	Пелешенко Н. ....	29	Котій О.А. ....	54
Чемеркіна І.О. ....	10, 18	Сарнацький К. ....	29	Кохан А.А. ....	55
Борисова Г.О. ....	10	Чернишева І.Е. ....	30	Ладюкова Д.І. ....	56
Коровіцький П.Р. ....	10, 18	Шевчук Ю.В. ....	31, 32	Наконечна Ю.В. ....	57
Довгич С.В. ....	11	Бака Л.М. ....	31	Бобокалонова Б.Б. ....	59
Деєва Ю.В. ....	11	Шидловська Т.А. ....	33, 34, 35, 36	Костюк Т.Р. ....	59
Маляренко Ю. ....	12	Безега Б.М. ....	34, 36	Маланчук В.О. ....	59
Заболотна Д.Д. ....	12, 13, 14, 16, 29, 91	Петрук Л.Г. ....	34	Васильєв О.С. ....	60
Куреньова К.Ю. ....	13	Крамаренко Р.П. ....	34	Чепурний Ю.В. ....	60, 69
Іванченко Т.Г. ....	13	Козак М.С. ....	35, 36	Копчак А.В. ....	60, 63, 69
Заболотний Д.І. ....	14, 15	Овсяник К.В. ....	35, 36	Вороді М.В. ....	61, 794
Ісмагілов Е.Р. ....	14	Козак-Волошаненко Ю.М. ....	35	Петрів Т.І. ....	61
Лукач Е.В. ....	15	Шушляпіна Н.О. ....	37, 77	Чешук Є.В. ....	61, 74
Діхтярук В.Я. ....	15	Носова Я.В. ....	37	Жмурко А.О. ....	63
Сережко Ю.О. ....	15	Чернякова О.Є. ....	37	Калашніков Д.О. ....	64
Кізім Я.В. ....	16	Khadidja Ahmat Saleh Hassan ....	40	Кебкало М.А. ....	65
Крук М.Б. ....	19	Mohamed Mohamed Ayman ....	41	Козак Б.М. ....	67
Крук М.М. ....	19	Rynda A.T. ....	42	Кочугур Ірина ....	58
Лобурець А.В. ....	20	RAJ DHIMAN ....	43, 44	Жабоедов Дмитро ....	58
Алексеева В.В. ....	21	Repale A.N. ....	46	Кравцова К.П. ....	68

Османов Б.Х.....	69	Шевченко М.С.....	75	Бондаренко Я.В.....	86
Снелл Й.....	69	Angel Angel.....	76	Борохович О.Г.....	988
Решетняк І.С.....	70	Бабенко Є.А.....	78	Куратнік Л.Л.....	90
Романенко Р.Р.....	71, 94	Драганчук Д.В.....	79	Малєєв Д.О.....	91, 92
Лазюк С.І.....	71	Кулакова Д.Д.....	81	Доні Д.О.....	92
Слободянюк А.С.....	72	Редька О.В.....	82	Назаренко Л.В.....	93
Ткачук А.В.....	73	Титарчук О.К.....	83	Тарасенко М.В.....	94
Ламза Нелля.....		Тонкошкур А.В.....	84	Світлична Ю.В.....	95
Василенко Марина.....		Трембовецька Ю.Б.....	85	Чернякова О.....	77

---

## ВЕСНЯНА СТУДЕНТСЬКА НАУКОВА СЕСІЯ – 2024

Квітень 22-26, 2024 Київ, Україна

## SPRING STUDENT'S SCIENTIFIC SESSION – 2024

April 22-26, 2024 Kyiv, Ukraine

---

Angel Angel.....	181, 185	Гікал Г. О.....	169	Муравйова А. К.....	126
Bilenka A.....	138	Грищенко А. Ю.....	106	Ніколаєва Є. С.....	106
Brynzei K.....	139	Грома М. О.....	162	Нінчук О. О.....	173
Divynets V. I.....	140	Гушул А. П.....	120	Огороднік Н. А.....	183
Dovhan M. O.....	141	Джобава К. Г.....	121	Осипова О. М.....	174
Fedoritenko A. R.....	98	Дніпровський А. С.....	122	Пилипчук В. І.....	175
Goncharov V.....	142	Доманський Р. В.....	165	Погоріла Ю. О.....	176
Grynenko I. V.....	143	Заїменко А. Є.....	148	Полушкіна А. Ю.....	156
Harshit Rai.....	181	Заріцька О. О.....	163	Райковська М. І.....	150
Plashko A.....	119	Зеленчук А. В.....	164	Рудик С. М.....	177
Kleban A. A.....	105	Івженко О. К.....	170	Рустамова М.....	157
Kostiuk T. O.....	99	Ільків Є. І.....	107	Савінова П. Ю.....	184
Leshchynska N. O.....	181	Карпенко Б. Є.....	154	Савченко І. Ю.....	136
Mukhailova K. I.....	100	Кодола М. В.....	123	Самойлова А. В.....	118
Pidrushnyak M. V.....	100	Кондратюк М. В.....	123	Сінельникова Є. В.....	113
Pysmeniuk V. O.....	101	Корчевна А. А.....	108	Столяр Д. О.....	151
Skritska A.....	144	Косовська Т. О.....	132	Сумарюк Б. М.....	109
Tychyna E.....	145	Кохан Б. І.....	133	Тимошенко Н. О.....	152
Vakhovska K.....	146	Кулик В. О.....	182	Тополук К. С.....	110
Vakula A.....	102	Куцик М. О.....	124	Туровець А. В.....	137
Yanushevych M. Yu.....	103	Лаговська Р. В.....	171	Угрімова А. С.....	127
Андрущенко В. І.....	160	Лаговський І. С.....	134	Ушакова С. С.....	178
Бабенко М. С.....	161	Ласкава Ю. С.....	155	Федоренко М. О.....	114
Бабич Д. І.....	147	Лисецький Б. Л.....	117	Федорович С. Є.....	179
Барбашова А. Г.....	128	Лозова Г. В.....	112	Цвела Є. В.....	158
Беда О. В.....	129	Ляшко Д. В.....	165	Чумак Є. А.....	180
Бреус А. Ю.....	104	Мамонтова В. Д.....	125	Чумакова Р. М.....	167
Бурмака О. В.....	171, 178	Мамонтова Т. В.....	125	Шевчук Ю. М.....	153
Валькман С. Р.....	122	Манченко О. В.....	174	Шкварок А. К.....	111
Ващенко Б. П.....	168	Мельник К. В.....	129	Юкіш Г. Я.....	120
Вовк А. В.....	130	Мехно Н. Я.....	166	Яковенко Н. О.....	181, 185
Вороной І. В.....	115	Миронова А. А.....	149	Яремчук О. З.....	166
Воротинцева Н. О.....	116	Михайленко О. В.....	172	Яструб А. С.....	159
Гейдарова Г. Ф.....	131	Мостова В. О.....	135	Яцків В. Р.....	112
Гетманчук В. Ю.....	1329	Музиченко А. С.....	106		