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



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

ПРОГНОЗУВАННЯ ГОСТРОЇ ТОКСИЧНОСТІ ПЕРСПЕКТИВНИХ ПРОТИПУХЛИННИХ ЗАСОБІВ – ПОХІДНИХ 5-АМІНО-1,3-ОКСАЗОЛ-4-ІЛ ТРИФЕНІЛФОСФОНІЄВИХ СОЛЕЙ

Ващенко Б. П.

Науковий керівник: к.пед.н, доцент Головченко О. І.

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: використання методів комп'ютерного прогнозування дозволяє оцінити біологічну активність сполук. Дані методи базуються на застосуванні різних математичних моделей, які беруть за основу аналіз зв'язку «структура – активність» для вже відомих сполук або на основі моделювання зв'язування структур з відомою або уявною мішенню. Важливим кроком у розробці нових лікарських засобів є прогнозування їх токсичності шляхом комп'ютерного скринінгу.

Мета роботи: прогнозування гострої токсичності перспективних протипухлинних засобів – похідних 5-аміно-1,3-оксазол-4-іл трифенілфосфонієвих солей.

Методи дослідження: для дослідження гострої токсичності 5-(2-гідроксиетил)-2-феніл-1,3-оксазол-4-іл]трифенілфосфоній перхлорату (I), [5-(3-гідроксипропіл)-2-феніл-1,3-оксазол-4-іл]трифенілфосфоній перхлорату (II), {5-[N-(2-гідроксиетил)(метил)]-2-феніл-1,3-оксазол-4-іл} трифенілфосфоній перхлорату (III) у щурів, використовуючи різні шляхи введення, був використаний метод комп'ютерного моделювання GUSAR.

Результати: проаналізувавши результати дослідження, можна зробити висновок, що сполука (I) відноситься до 4-го класу токсичності «практично нетоксичні сполуки» при внутрішньовенному, внутрішньочеревному та підшкірному шляхах введення та до 5-го класу токсичності «відносно нетоксичні сполуки» при пероральному шляху введення щурам (за класифікацією OECD). За результатами дослідження сполуку (II) можна віднести до 4-го класу токсичності «практично нетоксичні сполуки» при внутрішньовенному, внутрішньочеревному та підшкірному шляхах введення та до 5-го класу токсичності «відносно нетоксичні сполуки» при пероральному шляху введення щурам (за класифікацією OECD). Згідно з результатами прогнозування сполуку (III) слід віднести до 4-го класу токсичності «практично нетоксичні сполуки» при внутрішньовенному, внутрішньочеревному та підшкірному шляхах введення та до 5-го класу токсичності «відносно нетоксичні сполуки» при пероральному шляху введення щурам (за класифікацією OECD).

Висновки: згідно проведених розрахунків гострої токсичності, можна зробити висновок, що 5-(гідроксиналіламіно)-2-арил-1,3-оксазол-4-іл трифенілфосфонієві солі, котрі проявляють виражену протипухлинну активність, є малотоксичними сполуками. Вони відносяться до 4 та 5 класів токсичності, що дозволяє проводити серед такого типу сполук пошук перспективних лікарських засобів.

Ключові слова: гостра токсичність, трифенілфосфонієві солі, скринінг.

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
Iliashko 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	Тополок К. С.	110
Vakula A.	102	Куцик М. О.	124	Туровець А. В.	137
Yanushevych M. Yu.	103	Лаговська Р. В.	171	Утрімова 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
Вашенко 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	Міронова 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		