

Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/24-77-2-117
Цифровой идентификатор объекта – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-2-117
Поступила в редакцию 23 февраля 2024 г. УДК 547:785.

Прогноз биологической активности производных имидазола и бензимидазола

© Мелехина Юлия Евгеньевна, Юнникова*⁺ Лидия Петровна

Кафедра экологии и химических технологий. Пермский государственный аграрно-технологический университет им. академика Д.Н. Прянишникова. ул. Петропавловская, 23. г. Пермь, 614900.
Пермский край. Россия. E-mail: yunnikova@yahoo.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: имидазол, бензимидазол, биологическая активность.

Аннотация

Соединения, содержащие фрагменты имидазола и бензимидазола, проявляют разнообразные свойства и применяются во многих отраслях промышленности и сферах жизни. Некоторые из них являются действующими веществами лекарственных препаратов разного спектра действий: противовоспалительного (омепразол), иммуностимулирующего (дибазол), антигельминтного (альбендазол), противовирусного (энвираден), гипотензивного (кадесартан), и др. Фрагмент бензимидазола входит в состав важного витамина В₁₂. Для прогнозирования потенциальной биологической активности были использованы полученные ранее *N*-(ксантен-9-ил)имидазол, *N*-(тиоксантен-9-ил)имидазол, *N*-(1,3,5-циклогептатриен-7-ил)имидазол, *N*-(ксантен-9-ил)бензимидазол, *N*-(тиоксантен-9-ил)бензимидазол и 4-(7-циклогепта-1,3,5-триенил) бензимидазол, содержащие в своем составе фрагменты имидазола или бензимидазола, а также фрагменты тропилия, ксантилия или тиоксантилия. Установлено, что введение тропилиевого фрагмента значительно повышает прогнозируемую биологическую активность по сравнению с введением в молекулу фрагмента (тио)ксантена. Так, *N*-(1,3,5-циклогептатриен-7-ил)имидазол и 4-(7-циклогепта-1,3,5-триенил) бензимидазол с вероятностью 0.96 будут проявлять противоопухолевую и противонекротическую активности, а *N*-(1,3,5-циклогептатриен-7-ил)имидазол с вероятностью 0.897 будет проявлять противоартритную активность.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Мелехина Ю.Е., Юнникова Л.П. Прогноз биологической активности производных имидазола и бензимидазола. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.77. №2. С.117-120. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-2-117

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Мелехина Ю.Е., Юнникова Л.П. Прогноз биологической активности производных имидазола и бензимидазола. *Бутлеровские сообщения* С. 2024. Т.7. №1. Id.8. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-2-117/ROI-jbc-RC/24-7-1-8

The output for citing the English online version of the article:

Yulia E. Melekhina, Lidia P. Yunnikova. Prediction of biological activity of imidazole and benzimidazole derivatives. *Butlerov Communications* С. 2024. Vol.7. No.1. Id.8. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-77-2-117/ROI-jbc-C/24-7-1-8