



КЛИК-СИНТЕЗ, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ, ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ В ОТНОШЕНИИ РАКА МОЛОЧНОЙ ЖЕЛЕЗЫ (MDA-MB 231) И АНТИ-ВИЧ-АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,4-ДИЗАМЕЩЕННЫХ-1,2,3-ТРИАЗОЛТИМИНА¹

© 2020 Faeza Abdul Kareem Almashal*, Hamsa Hussein Al-Hujaj**,
Ahmed Majeed Jassem*,# and Najim Aboud Al-Masoudi***

*College of Education for Pure Sciences, Department of Chemistry, Basrah University, Basrah, Iraq

**College of Pharmacy, University of Basrah, Basrah, Iraq

***College of Science, Department of Chemistry, Basrah University, Basrah, Iraq

Поступила в редакцию 02.12.2019 г.

После доработки 17.12.2019 г.

Принята к публикации 27.12.2019 г.

Новая серия производных 1,4-дизамещенных 1,2,3-триазолтимина (**VIa–e**) была синтезирована и охарактеризована с помощью спектроскопических исследований. Цитотоксические активности *in vitro* выбранных соединений против линии раковых клеток человека (MDA-MB 231) оценивали с помощью анализа МТТ. 4-Азидо-*N*-замещенные бензолсульфонамиды (**Vc–e**) и 4,4'-(4,4'-((5-метил-2,4-диоксопиримидин-1,3(2*H*, 4*H*)-диил)бис(метилен))-бис(1*H*-1,2,3-триазол-4,1-диил))-бис(*N*-(4-метилпиримидин-2-ил)бензолсульфонамид) (**VIc**) проявлял значительную цитотоксическую активность с значениями IC_{50} 1.61, 1.41, 1.61 и 1.81 мкМ соответственно. Молекулярное док-исследование 4-азидо-*N*-(4,6-диметилпиримидин-2-ил)бензолсульфонамида (**Vd**) и 4,4'-(4,4'-((5-метил-2,4-диоксопиримидин-1), 3(2*H*, 4*H*)-диил)бис(метилен))-бис(1*H*-1,2,3-триазол-4,1-диил))-бис(*N*-(4-метилпиримидин-2-ил)бензолсульфонамид) (**VIc**) показало водородную связь с аминокислотными остатками рецепторов 1X7R и 1A53 соответственно. Эти производные полезны в качестве отправных точек для дальнейшего изучения новых противоопухолевых препаратов и для подтверждения потенциала триазолсульфонамидных аналогов в качестве соединений свинца при открытии противоопухолевых препаратов. Кроме того, производные 1,4-дизамещенных-1,2,3-триазолтимина (**VIa–e**) были оценены *in vitro* на противовирусную активность в отношении репликации ВИЧ-1 и ВИЧ-2 в клетках МТ-4. Результаты показали, что производные 1,4-дизамещенного-1,2,3-триазолтимина (**VIc–e**) обладают сильной активностью в отношении репликации ВИЧ-1 со значениями IC_{50} 11.42, ≥ 15.25 и 14.36 мкМ, $SI > 4$, ≤ 6 , > 9 соответственно.

Ключевые слова: клеточная линия рака молочной железы (MDA-MB 231), анти-ВИЧ активность, молекулярный докинг, клик-реакция, производные 1,2,3-триазолтимина

DOI: 10.31857/S0132342320030033

¹ Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

Автор для связи: (эл. почта: ahmed.majedd@uobasrah.edu.iq).