

PLANTA+

НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА

SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION

**23 січня 2026 р.
м. Київ, Україна**

*January 23, 2026
Kyiv, Ukraine*

**Том 1
Volume 1**

**20
26**



ПРОГНОЗУВАННЯ ФАРМАКОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ПОХІДНОЇ 1,3-ОКСАЗОЛ-4-ІЛ-ФОСФОНОВОЇ КИСЛОТИ (ОВП-1)

Деніскіна Є.Р., Кузнецова О.В.

Національний медичний університет імені О.О. Богомольця,
м. Київ, Україна

evadenikina@ukr.net, olena.kuznetsova@nmu.ua

Ключові слова: діетиловий естер 5-алкіламіно-2-{N-[N-бензоїл-(4-метилбензиліден)гліцил] амінометил}-1,3-оксазол-4-ілфосфонової кислоти, ОВП-1, *in silico* прогнозування, фармакологічна активність.

Вступ. Останніми роками значна увага дослідників у галузі фармацевтичної хімії приділяється сполукам на основі 1,3-оксазолу, оскільки вони характеризуються широким спектром потенційної фармакологічної активності. За даними літератури, похідні 1,3-оксазолу проявляють широкий спектр дії: протівірусну, протипухлинну, антимікробну [4], фунгіцидну [1], цукрознижувальну [5], антидепресантну та антигіпертензивну [2]. Структурні особливості оксазольного кільця, зокрема наявність реакційно-активних центрів у положеннях C₂, C₄, C₅, N₁ та O₃, створюють передумови для цілеспрямованої хімічної модифікації молекули з метою зміни її фізико-хімічних властивостей, а також біологічної й фармацевтичної активності. У зв'язку з цим 1,3-оксазол розглядається розробниками сучасних лікарських засобів як перспективний базовий scaffold для синтезу нових активних фармацевтичних інгредієнтів.

Мета роботи – оцінка потенційної фармакологічної активності похідної 1,3-оксазол-4-іл-фосфонової кислоти (ОВП-1) за допомогою комп'ютерного *in silico* прогнозування.

Матеріали і методи. Об'єктом дослідження обрана сполука ОВП-1 (повна назва діетиловий естер 5-алкіламіно-2-{N-[N-бензоїл-(4-метилбензиліден)гліцил] амінометил}-1,3-оксазол-4-ілфосфонової кислоти, скорочена назва – похідне 1,3-оксазол-4-іл-фосфонової кислоти). Для комп'ютерного прогнозування біологічної та фармакологічної активності ОВП-1 було використано веб-сервіс SwissTargetPrediction [3].

Результати та їх обговорення. Серед ідентифікованих біологічних мішеней особливу увагу привертає можливий зв'язок ОВП-1 з рецепторами ангіотензину II типу 1A та 1B. Відомо, що зазначені рецептори відіграють ключову роль у регуляції функцій серцево-судинної системи, клітинної проліферації, оксидативного стресу та водно-сольового гомеостазу. Потенційна спорідненість ОВП-1 до цих рецепторів свідчить про здатність сполуки впливати на патогенетичні механізми розвитку гіпертензії, що відкриває перспективи для подальших досліджень її фармакологічного потенціалу у контексті нормалізації судинного тонуусу та поліпшенню трофіки тканин.

Однією з імовірних біологічних мішеней ОВП-1 є ванілоїдний рецептор першого типу (TRPV1). TRPV1 є ліганд-керованим неселективним катіонним каналом, який відіграє важливу роль у розвитку запалених реакцій та формуванні клітинної відповіді на хімічні й фізичні стресові чинники. Виявлена афінність ОВП-1 до TRPV1 свідчить про потенційну здатність сполуки впливати на

сенсорні сигнальні шляхи, регулювати клітинну збудливість та сприяти адаптації до ушкоджувальних стимулів, що робить ванілоїдний рецептор першого типу перспективною біологічною мішенню для реалізації протизапальних та анальгетичних ефектів.

Ще однією потенційною мішенню ОВП-1 може бути mTOR-серин-треонінова протеїнкіназа. Оскільки mTOR є центральним регулятором клітинного росту, проліферації, аутофагії та метаболічної активності, ймовірна спорідненість ОВП-1 до цього ензиму може свідчити про здатність сполуки впливати на ключові внутрішньоклітинні сигнальні каскади, що визначають клітинний гомеостаз і відповідь організму на стрес.

Крім того, серед можливих біологічних мішеней ОВП-1 ідентифіковано протеїнкіназу А — ключовий ензим цАМФ-залежного сигнального шляху, який регулює численні метаболічні процеси у клітині. Ймовірна спорідненість ОВП-1 до протеїнкінази А може вказувати на здатність сполуки модулювати внутрішньоклітинну передачу сигналів, що узгоджується з її можливим впливом на механізми клітинної адаптації та стрес-відповіді.

Висновки. Отримані дані свідчать про наявність широкого спектру потенційних взаємодій ОВП-1 з рецепторними білками та ензимами. Це обґрунтовує доцільність проведення доклінічних досліджень зазначеної похідної 1,3-оксазол-4-іл-фосфонової кислоти та дає підстави розглядати ОВП-1 як перспективну сполуку для подальшого експериментального вивчення її фармакологічної активності в умовах патологічних процесів.

Перелік посилань:

1. Metelytsia, L. O., Trush, M. M., Kovalishyn, V. V., Hodyna, D. M., Kachaeva, M. V., Brovarets, V. S., Pilyo, S. G., Sukhovcev, V. V., Tsyhankov, S. A., Blagodatnyi, V. M., & Semenyuta, I. V. (2021). 1,3-Oxazole derivatives of cytosine as potential inhibitors of glutathione reductase of *Candida* spp.: QSAR modeling, docking analysis and experimental study of new anti-*Candida* agents. *Computational biology and chemistry*, 90, 107407. <https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2020.107407>
2. Nizhenkovska, I. V., Matskevych, K. V., Golovchenko, O. I., Golovchenko, O. V., Kustovska, A. D., & Van, M. (2023). New Prospective Phosphodiesterase Inhibitors: Phosphorylated Oxazole Derivatives in Treatment of Hypertension. *Advanced pharmaceutical bulletin*, 13(2), 399–407. <https://doi.org/10.34172/apb.2023.044>
3. SwissTargetPrediction. https://www.swisstargetprediction.ch/result.php?job=146202734&organism=Rattus_norvegicus
4. Tiwari, D., Narang, R., Sudhakar, K., Singh, V., Lal, S., & Devgun, M. (2022). 1,3,4-oxadiazole derivatives as potential antimicrobial agents. *Chemical biology & drug design*, 100(6), 1086–1121. <https://doi.org/10.1111/cbdd.14100>
5. Wang, R., Chen, K., Liu, S., Ren, R., Hou, H., Zeng, Q., Zhang, Y., & Liu, Y. (2024). Design, synthesis and biological evaluation of novel oxazole derivatives as potential hypoglycemic agents. *Bioorganic & medicinal chemistry*, 114, 117961. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2024.117961>.