

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
БУКОВИНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

МАТЕРІАЛИ

II науково-практичної інтернет-конференції
**РОЗВИТОК ПРИРОДНИЧИХ НАУК
ЯК ОСНОВА НОВІТНІХ
ДОСЯГНЕНЬ У МЕДИЦИНІ**



*м. Чернівці
22 червня 2022 року*

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
MINISTRY OF HEALTH OF UKRAINE
BUKOVINIAN STATE MEDICAL UNIVERSITY

CONFERENCE PROCEEDINGS

II Scientific and Practical Internet Conference **DEVELOPMENT OF NATURAL SCIENCES AS A BASIS OF NEW ACHIEVEMENTS IN MEDICINE**



Chernivtsi, Ukraine
June 22, 2022

УДК 5-027.1:61(063)

Р 64

Медицина є прикладом інтеграції багатьох наук. Наукові дослідження у сучасній медицині на основі досягнень фізики, хімії, біології, інформатики та інших наук відкривають нові можливості для вивчення процесів, які відбуваються в живих організмах, та вимагають якісних змін у підготовці медиків. Науково-практична інтернет-конференція «**Розвиток природничих наук як основа новітніх досягнень у медицині**» покликана змінювати свідомість людей, характер їхньої діяльності та стимулювати зміни у підготовці медичних кадрів. Вміле застосування сучасних природничо-наукових досягнень є запорукою подальшого розвитку медицини як галузі знань.

Конференція присвячена висвітленню нових теоретичних і прикладних результатів у галузі природничих наук та інформаційних технологій, що є важливими для розвитку медицини та стимулювання взаємодії між науковцями природничих та медичних наук.

Голова науково-організаційного комітету

Володимир ФЕДІВ професор, д.фіз.-мат.н., завідувач кафедри біологічної фізики та медичної інформатики Буковинського державного медичного університету

Члени науково-організаційного комітету

Тетяна БІРЮКОВА к.тех.н., доцент кафедри біологічної фізики та медичної інформатики Буковинського державного медичного університету

Оксана ГУЦУЛ к.фіз.мат.н., доцент кафедри біологічної фізики та медичної інформатики Буковинського державного медичного університету

Марія ІВАНЧУК к.фіз.мат.н., доцент кафедри біологічної фізики та медичної інформатики Буковинського державного медичного університету

Олена ОЛАР к.фіз.мат.н., доцент кафедри біологічної фізики та медичної інформатики Буковинського державного медичного університету

Почесний гість

Prof. Dr. Anton FOJTIK Факультет біомедичної інженерії, Чеський технічний університет, м.Прага, Чеська республіка

Комп'ютерна верстка:

Марія ІВАНЧУК

Розвиток природничих наук як основа новітніх досягнень у медицині: матеріали II науково-практичної інтернет-конференції, м. Чернівці, 22 червня 2022 р. / за ред. В. І. Федіва – Чернівці: БДМУ, 2022. – 489 с.

У збірнику подані матеріали науково-практичної інтернет-конференції «Розвиток природничих наук як основа новітніх досягнень у медицині». У статтях та тезах представлені результати теоретичних і експериментальних досліджень.

Матеріали подаються в авторській редакції. Відповідальність за достовірність інформації, правильність фактів, цитат та посилань несуть автори.

Для наукових та науково-педагогічних співробітників, викладачів закладів вищої освіти, аспірантів та студентів.

Рекомендовано до друку Вченою Радою Буковинського державного медичного університету (Протокол №11 від 22.06.2022 р.)

ISBN 978-966-697-983-7

nanogels and tissue engineering. Further researches are aimed to use stem cells in combination with described methods for even more advanced clinical results.

References

1. Lina F, Yue Z, Jin Z, Guang Y. Bacterial cellulose for skin repair materials. *Biomedical Engineering—Frontiers and Challenges*. 2011;249-74.
2. Priya SG, Jungvid H, Kumar A. Skin tissue engineering for tissue repair and regeneration. *Tissue Engineering Part B: Reviews*. 2008;14(1):105-18.
3. Souto Eliana B, Ribeiro AF et al. New nanotechnologies for the treatment and repair of skin burns infections. *International Journal of Molecular Sciences*. 2020;21.2:393.
4. Zulkifli, Farah Hanani, et al. A facile synthesis method of hydroxyethyl cellulose-silver nanoparticle scaffolds for skin tissue engineering applications. *Materials Science and Engineering*. 2017;79:151-60.

Pylypenko O.O.^{1,2}, Sviatenko L.K.³, Okovytyy S.I.²

Hydrolytic decomposition of pyrimidine cycle in 2-hetaryl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazolines.

DFT study

¹ *Donetsk National Medical University, Kropyvnytskyi, Ukraine*

² *Dnipro National University, Dnipro, Ukraine*

³ *Jackson State University, Jackson, Mississippi, United States*

Pilipenkoolena1@gmail.com

The development of new drugs based on triazoles is important in modern synthetic chemistry and pharmacology. Compounds of 1,2,4-triazoles have a wide range of biological activity [1]. Their research using modern computer technology facilitates long-term experimental processes. In particular, quantum chemical modeling and DFT study [2].

Synthesis of novel potential anticancer agents 2-hetaryl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazolines requires investigation of their properties. Quantum chemical calculations can predict reactivity of the compounds in different reactions. We modeled mechanism of hydrolysis of 2-furyl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazoline at SMD/B3LYP/6-31+G(d) theory level (Figs. 1-2)

An initial water molecule attachment occurs rather to C5-N6 bond than to N4-C5 bond of 2-furyl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazoline (Fig.1). Proton transfer from oxygen atom to nitrogen atom leads to cycle rupture. Next water molecule attacks carbonyl group with formation of diol which easily lost formic acid that results in 3-(2-furyl)-5-(2-aminophenyl)-1,2,4-triazole producing. High activation barriers of the pathway confirms that hydrolysis may occur at high temperature. To reduce activation energy acidic catalysis for hydrolysis was modeled.

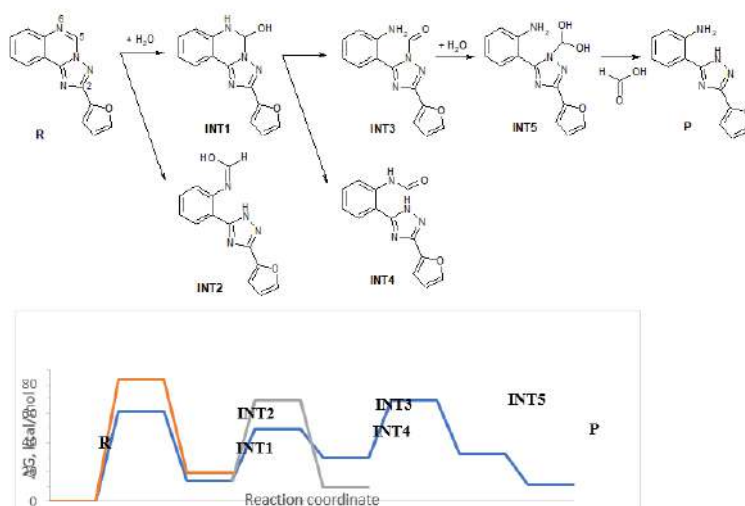


Fig.1. Proposed mechanism for hydrolysis of 2-furyl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazoline along with SMD/B3LYP/6-31+G(d) calculated Gibbs free energy diagram

Protonation of the initial 2-furyl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazoline causes increasing positive charge on carbon atom C5 approximately on 0.13 (Table 1), that promotes reaction of the heterocycle with water (Fig.2).

Table 1

Charges on N6 and C5 atoms of 2-hetaryl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazolines and their protonated forms

N6	-0.289	-0.387	-0.290	-0.389	-0.309	-0.393	-0.393
C5	0.250	0.382	0.248	0.379	0.240	0.381	0.381

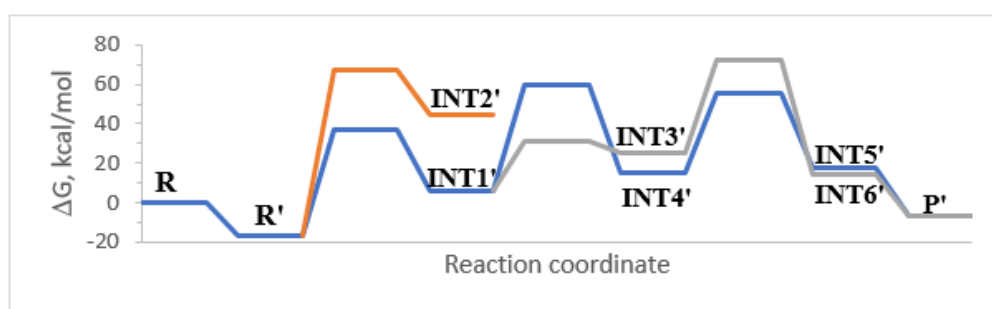
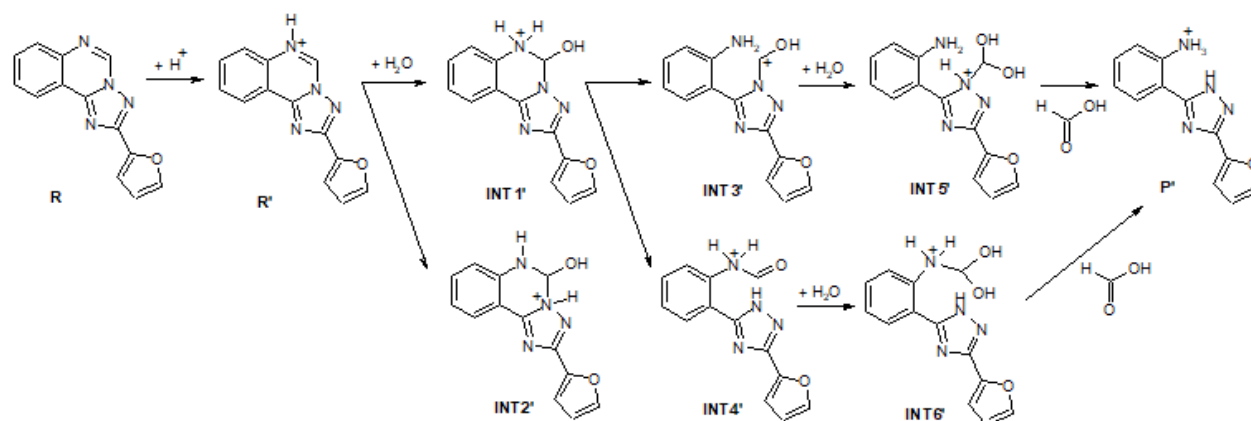


Fig.2. Proposed mechanism for acid-catalyzed hydrolysis of 2-furyl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazoline along with SMD/B3LYP/6-31+G(d) calculated Gibbs free energy diagram

Acid-catalyzed hydrolysis proceeds through positively charged intermediates INT1'-INT6' (Fig.2). Calculated activation barriers are slightly lower than those for non-catalyzed reaction. Still high activation energies for acid-catalyzed hydrolysis lead to conclusion that the reaction may occur at high temperature. Calculated activation energies for acid-catalyzed hydrolysis of 2-thiophenyl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazoline and 2-pyrrolyl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazoline show only insignificant difference as compared with 2-furyl[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazoline. The fact may be explained by close values of charges on atoms C5 and N6 for all studied compounds in protonated as well as in neutral forms (Table 1).

Proposed mechanism of hydrolysis may be extended to different heterocyclic compounds containing [1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazoline moiety.

References

1. Shneine J. K. & Alaraji Y H. (2016) Chemistry of 1, 2, 4-Triazole: A Review Article *International Journal of Science and Research*, (5), 1411-1423
2. Mourik T, Buhl M and Gageot M.-P.(2014) Density functional theory across chemistry, physics and biology. *Phil. Trans. R. Soc. A*, (372), 1-5 <http://dx.doi.org/10.1098/rsta.2012.0488>