



## **Резюме на проект по Фонд „Наука“ № 18019 – Конкурсна сесия 2018:**

**„Синтез и охарактеризиране на нови нитроимидазолови производни с потенциален биологичен ефект“**

**Ръководител: Доц. Светлана Фоткова Георгиева, дф**

Целта на настоящия проект е да се създаде методика за синтез на нови заместени производни на нитроимидазолите с потенциален биологичен ефект.

Във връзка с поставената цел ще бъдат изпълнени следните задачи:

1. Създаване на методика за синтез на нови amidни производни на нитроимидазоли;
2. Структурно охарактеризиране на новите аналози чрез инструментални методи за анализ: ИЧ спектроскопия, ЯМР спектроскопия, УВ-ВИС спектроскопия;
3. Теоретична оценка на вероятен кожен метаболизъм на изходния нитроимидазол, неговите метаболити и нови производни;
4. Теоретична оценка на вероятен микробен метаболизъм на изходния нитроимидазол, неговите метаболити и нови производни. Очакваните резултати от научния проект са свързани с определянето на потенциалната биологична активност на новосинтезираните нитроимидазолови производни. Това би довело до бъдещи изследвания на биологичното действие на новите съединения, свързани с профила на безопасност и действието на други групи лекарствени структури с подобен строеж, с цел прецизиране терапията на социално-значими заболявания.

**От получените резултати може да се заключи, че:**

1. Разработен е двуетапен метод за синтез на amidни производни на метронидазол, в резултат на който са получени две нови amidни производни.
2. Новите съединения са структурно охарактеризирани с помощта на ИЧ,  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  ЯМР и УВ-ВИС спектроскопия.
3. Разработен е УВ-ВИС метод за оценка на хидролитичната стабилност на новите съединения, който ги определя като стабилни при зададените условия.

4. С помощта на методи за математично прогнозиране бе изследван вероятния кожен метаболизъм на новите амидни производни. Отчетено е, че те проявяват възможност за кожна метаболитна активация за разлика от изходната структура.
5. С помощта на методи за математично прогнозиране бе изследван вероятния микробен метаболизъм на новите амидни производни. Отчетено е, че QSAR Toolbox симулатор на микробен метаболизъм регистрира метаболитна активация и 59 потенциални метаболита за МТ2 и 72 метаболита за МТ3.