

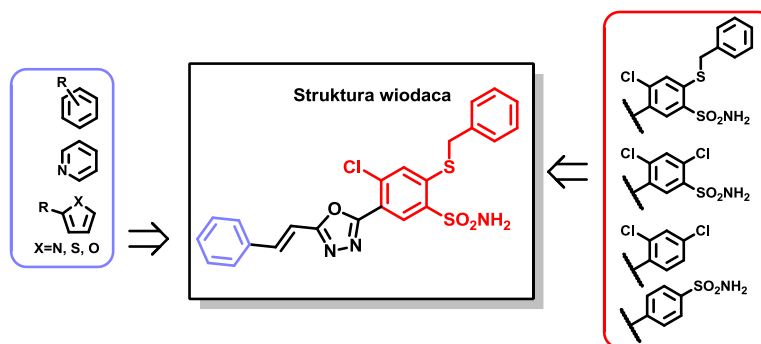
ANALIZA SAR I QSAR POCHODNYCH (E)-5-(2-ARYLOWINYLO)-1,3,4-OXSADIAZOL-2-YLO)BENZENOSULFONAMIDU

Krzysztof Szafranski^{1,*}, Jarosław Sławiński¹, Łukasz Tomorowicz¹, Anna Kawiak²

¹Katedra i Zakład Chemii Organicznej, Wydział Farmaceutyczny z OML, Gdański Uniwersytet Medyczny

²Katedra Biotechnologii, Międzyuczelniany Wydział Biotechnologii UG-GUMed

Aby dowiedzieć się więcej na temat zależności struktura-aktywność pochodnych (E)-3-(5-styrylo-1,3,4-oksadiazol-2-ylo)benzenosulfonamidu, które w naszych poprzednich badaniach wykazały obiecującą aktywność przeciwnowotworową in vitro [1], zsyntetyzował grupę nowych (E)-4/5-[(5-(2-arylowinylo)-1,3,4-oksadiazol-2-ylo)]benzenosulfonamidów, a także (E)-2-(2,4-dichlorofenylo)-5-(2-arylowinylo)-1,3,4-oksadiazoli.



Rys. Kierunki modyfikacji struktury wyjściowej

Struktura nowych związków została określona przy użyciu metod spektroskopowych: IR, ¹H NMR, ¹³C NMR, oraz analizą elementarną.

Wszystkie docelowe pochodne oceniano pod kątem aktywności przeciwnowotworowej wobec linii ludzkich komórek nowotworowych raka okrężnicy (HCT-116), raka piersi (MCF-7) i raka szyjki macicy (HeLa). Uzyskane wyniki przeanalizowano w celu wyjaśnienia wpływu budowy podstawnika 2-arylo-winylowego i szkieletu benzenosulfonamidowego na działanie przeciwnowotworowe.

Związek **31**, zawierający ugrupowanie 5-nitotiofenu, wykazał najsilniejsze działanie przeciwnowotworowe przeciwko liniom komórkowym HCT-116, MCF-7 i HeLa, z wartościami IC₅₀ odpowiednio 0,5, 4 i 4,5 μM. Analiza zależności struktura-aktywność wykazała istotne różnice w aktywności w zależności od podstawnika w pozycji 3 pierścienia benzenosulfonamidowego i wskazała jako optymalną pozycję meta ugrupowania sulfonamidowego w stosunku do pierścienia oksadiazolu.

PIŚMIENNICTWO:

[1] SŁAWIŃSKI, J. ET AL. "NOVEL 2-BENZYLTHIO-5-(1,3,4-OXADIAZOL-2-YL)BENZENESULFONAMIDES WITH ANTICANCER ACTIVITY: SYNTHESIS, QSAR STUDY, AND METABOLIC STABILITY". *EUR. J. MED. CHEM.* 2017, 132, 236–248

[2] SZAFRĄŃSKI K. ET AL. "SYNTHESIS, ANTICANCER EVALUATION AND STRUCTURE-ACTIVITY ANALYSIS OF NOVEL (E)-5-(2-ARYLVINYLO)-1,3,4-OXSADIAZOL-2-YLO)BENZENESULFONAMIDES." *INT. J. MOL. SCI.* 2020 VOL. 21, 2235.

kontakt: krzysztof.szafranski@gumed.edu.pl