

IN SILICO ISPITIVANJE ODABRANIH DERIVATA BENZIMIDAZOLA U POTRAZI ZA NOVIM POTENTNIM ANTIMIKROBNIM AGENSIMA

Jelena V. Živković, Sandra G. Kalauzović, Maja R. Milosavljević, Kristina G. Kalauzović

Univerzitet u Nišu, Medicinski fakultet, Katedra za farmaciju, Niš, Srbija

Kontakt: Jelena V. Živković
Bul. dr Zorana Đinđića 81, 18000, Niš, Srbija
E-mail: jelena.zivkovic.hemija@medfak.ni.ac.rs

Benzimidazoli su heterociklična jedinjenja koja predstavljaju farmakofore mnogih lekova. Pored antimikrobne (antibakterijske i antifungalne) aktivnosti, derivati benzimidazola su izuzetno efikasna jedinjenja koja pokazuju širok spektar bioloških aktivnosti. Korišćenjem kompjuterskih programa Molinspiration, SwissADME i OSIRIS Data Warrior, ispitivane su farmakokinetičke i toksikološke osobine četrdeset dva derivata benzimidazola. Jedinjenja su ispunila sve kriterijume za zadovoljavajuću oralnu bioraspoloživost. Za većinu je predviđeno da su netoksična, a potencijalno iritantno delovanje nije utvrđeno ni u jednom slučaju. Na kraju, na osnovu povoljnih farmakokinetičkih parametara i toksikoloških karakteristika selektovano je devet najobećavajućih derivata. Sposobnost prolaska kroz hematoencefalnu barijeru se očekuje za sve komponente osim jedne, a nijedna od odabranih nije supstrat za P-glikoprotein. Metaboličke karakteristike selektovanih jedinjenja su takođe povoljne, jer se predviđa inhibicija ne više od tri citohrom P450 izoenzima i odsustvo toksičnosti.

Acta Medica Medianae 2019;58(1):106-115.

Ključne reči: antimikrobni agensi, benzimidazoli, bioraspoloživost, in silico ispitivanje, toksikološke osobine