



STUDENTŲ MOKSLINIAI TYRIMAI

2023/2024
Konferencijos pranešimų santraukos



Lietuvos
mokslo
taryba

ISSN 2669-2074

© Lietuvos mokslo taryba, 2024

<u>D. Gabulaitė</u> , B. Jakštys, S. Šatkauskas SĄRYŠIO TARP VIDULĄSTELINIŲ MOLEKULIŲ IŠTEKĖJIMO IR LAŠTELIŲ GYVYBINGUMO PO ELEKTROPORACIJOS TYRIMAS	142
<u>S. Pakštys</u> , V. Andrulevičienė ARTIMĄJĄ INFRARAUDONŲJŲ SPINDULIŲ ABSORBCIJA PASIŽYMINČIŲ JUNGINIŲ MODELIAVIMAS TAIKANT KVANTINĖS CHEMIJOS SKAIČIAVIMUS: TEORIJA IR PRAKTIKA	144
<u>D. Vištorskaja</u> , J. Gaidukevič ATEITIES TECHNOLOGIJOMS NAUJŲ AUKŠTOS ENTROPIJOS MIŠRIŲ METALŲ GRANATŲ SINTEZĖ ZOLIŲ-GELIŲ METODU	147
<u>G. Varnelytė</u> , B. Ravoitytė BAKTERIJŲ IR ATSPARUMO ANTIBIOTIKAMS GENŲ PAIEŠKA JUODOSIOS PLOKŠČIAMUSĖS LERVOSE	149
<u>G. Rankelytė</u> , J. Chmeliiov, A. Gelžinis, L. Valkūnas PIRMOSIOS FOTOSISTEMOS ŠVIESORANKOS KOMPLEKSŲ BALTYMINĖS APLINKOS ELEKTROSTATINĖ ĮTAKA PIGMENTŲ SUŽADINTOSIOMS BŪSENOMS	150
<u>E. Lugauskas</u> , A. Kareiva PEROVSKITO NANODALELIŲ, TURINČIŲ ORTOROMBINĘ STRUKTŪRĄ, SINTEZĖ IR SAVYBIŲ TYRIMAS	152
<u>I. Bartkevičiūtė</u> , V. Kederienė BIPIRAZOLO DARINIŲ SINTEZĖ, FUNKCIONALIZAVIMAS IR SAVYBIŲ TYRIMAI	154
<u>R. Bertašius</u> , T. Venckūnas LIEKAMASIS ILGOS KELIONĖS DVIRAČIU POVEIKIS METABOLIZMUI BEI RAUMENŲ SAVYBĖMS	155
<u>M. Tamošiūnaitė</u> , K. Daniūnaitė HISTONŲ METILINIMĄ VALDANČIŲ GENŲ RAIŠKOS REGULIACIJOS TYRIMAI PROSTATOS VĖŽIO LAŠTELIŲ LINIJOSE	156
<u>B. Škėlaitė</u> , I. Grigelionis ŠILUMINIŲ TERAHERCINĖS SPINDULIUOTĖS ŠALTINIŲ SU PUSLAIDININKINIAIS METAPAVIRŠIAIS SPEKTRINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS	158
<u>L. Šauklytė</u> , E. Kuncevičienė KRAUJYJE CIRKULIUOJANČIŲ MIRR TYRIMAI PACIENTAMS SU DEMIELINIZUOJANČIOMIS PATOLOGIJOMIS	160
<u>M. Repšytė</u> , dr. M. Norkienė LENTIVIRUSŲ, EKSPONUOJANČIŲ ORTOMIKSOVIRUSŲ GLIKOPROTEINUS, PATEKIMO Į VABZDŽIO LAŠTELES TYRIMAS	163
<u>M. Jokubauskaitė</u> , E. Dudutienė GaAsBi/AlGaAs KVANTINIŲ DUOBIŲ FOTOLIUMINESCENCIJOS PRIKLAUSOMYBĖS NUO BARJERŲ FORMOS TYRIMAS	166
<u>E. Pečiukaiytė</u> , S. Steponkienė APKONVERTUOJANČIŲ NANODALELIŲ IR CHLORINO E6 KOMPLEKSAS: TERANOSTIKOS LINK	168
<u>S. Barysaitė</u> , A. Gelžinis CP29 KOMPLEKSO BALTYMŲ ĮTAKA CHLOROFILŲ SUŽADINTOMS BŪSENOMS	171
<u>R. Gelminauskaitė</u> , V. Mickevičius 5-OKSOPROLIDIN-3-KARBOKSIRŪGŠTIES DARINIŲ, TURINČIŲ 3-KARBOKSI-4-HIDROKSIFENILFRAGMENTĄ MODIFIKACIJA IR SAVYBIŲ TYRIMAS	173
<u>G. Pranaitytė</u> , B. Grybaitė PAKEISTŲ N-(2-(1H)-BENZ[d]IMIDAZOL-2-IL)ETIL)-2,4-DIFLUORANILINO DARINIŲ SINTEZĖ IR PRIŠVĖŽINIŲ SAVYBIŲ TYRIMAS	175
<u>P. Bialaglovytė</u> , R. Mikšiūnas MITOCHONDRIJAS APSAUGANČIŲ ANTIOKSIDANTŲ POVEIKIS HL-1 KARDIOMIOCITŲ GYVYBINGUMUI IR KALCIO SIGNALAMS HIPOKSIJOS - REOKSIGENACIJOS SĄLYGOMIS	177
<u>J. Kvedaravičius</u> , A. Kononovičius ERDVINIO RINKĖJO MODELIO RANGŲ DINAMIKOS APRAŠYMAS FOKERIO-PLANKO LYGTIMI	179

BIPIRAZOLO DARINIŲ SINTEZĖ, FUNKCIONALIZAVIMAS IR SAVYBIŲ TYRIMAI

Pirazolo struktūrinį elementą turintys junginiai pasižymi plačiomis pritaikymo galimybėmis, todėl jį dažnai galima aptikti ir vaistinių preparatų sudėtyje. Be to, pirazolo darinių tyrimai yra patraukli sritis dėl šių junginių demonstruojamo biologinių savybių spektro, nes nustatyta, jog šie junginiai gali pasižymėti antibakteriniu, antioksidaciniu, priešuždegiminiu, antimaliariniu, priešvėžiniu ir kt. aktyvumu. [1] Kita vertus, giminingų bipirazolo darinių kūrimas ir tyrimai yra sulaukę sąlyginai mažesnio dėmesio, tačiau atliekami tyrimai įrodo išskirtinį šių junginių charakteristikų spektrą, saugumą ir palankias savybes vartojimui. Teigiama, kad dariniai su dviem ir daugiau žiedų yra stabilesni, sukelia mažiau šalutinių poveikių. Bipirazolai turi potencialą kaip prieštuberkulioziniai, priešvėžiniai, priešuždegiminiai, antioksidaciniai ar antibakteriniai agentai [1–5], kas galimai prisidėtų prie išskylančių farmacinės ir medicininės chemijos iššūkių, kaip atsparumas gydymui ir efektyvumo ar specifiskumo stygius. Egzistuojantis biologiškai aktyvių junginių poreikis dažnai prisideda prie ekologinių ir ekonominių aspektų, todėl verta atkreipti dėmesį į atomo ekonomijos, efektyvesnių metodų taikymą, saugesnių cheminių medžiagų vartojimą ir vartojimą mažesniais kiekiais, papildomai siekiant sumažinti ir atliekų kiekį išlaikant reakcijų efektyvumą. [1–5] Remiantis surinkta ir išanalizuota informacija kryptingai suformuotas pagrindinis šio tyrimo tikslas, kuris yra susintetinti naujas bipirazolo sistemas, atlikti jų funkcionalizavimą ir ištirti savybes.

Neturint komercinių pradinių medžiagų, nuspręsta jas susintetinti pradedant nuo pirazolkarbaldehido gavimo remiantis žinomomis metodikomis. [6] Tam buvo panaudota dviejų pakopų reakcija, pradžioje atliekant pirazolo alkoholio alkilimą. Toliau tarpinis junginys buvo veikiamas Vilsmėjerio-Hako kompleksu. Pirazolkarbaldehidas vėliau buvo veikiamas atitinkamais hidrazino hidrohloridais, kad gauti pakeistus hidrazonus. Šis etapas prisideda prie žaliojo kurso, kaip tirpiklį naudojant etanolį, kuris yra netoksiškas ir lengvai regeneruojamas. Be to, šios reakcijos vykdomos sąlyginai trumpą laiką; po išsodinimo reakcijų produktai gauti geromis išeigomis ir be papildomo kolonėlinės chromatografijos gryninimo etapo. Iš hidrazonų atitinkamai buvo susintetinti bipirazolai hidrazonus ciklizuojant su natrio nitritu. Minėtos reakcijos leido pasiekti geras produktų išeigas.

Turint susintetintus bipirazolus ir juos modifikavus prijungiant triflato grupę, atliktos katalizės reakcijos su įvairiomis boro rūgštimis. Katalizatorių naudojimas išsiskiria selektyvumu, greičiu, galimybe juos pakartotinai naudoti ir nesudėtingu atskyrimu iš reakcijos mišinių. Visais atvejais produktai gauti nuo vidutinių iki gerų išeigų, bei atlikti tyrimai, patvirtinantys jų struktūrinį egzistavimą.

Atlikta daugiapakopė funkcionalizuotų bipirazolo darinių sintezė; pastebėta, kad reakcijų eiga ir baigtis glaudžiai susijusi su sąlygomis ir naudojamų junginių pobūdžiu, todėl tolimesnių tyrimų metu būtų galima išsamiau išnagrinėti kiekvieno etapo reakcijos priklausomybę nuo sudaromų sąlygų, kad užtikrinti didžiausią įmanomą efektyvumą.

Literatūra

- [1] Mogle, P. P., Meshram, R. J., Hese, S. V., Kamble, S. S., Gacche, R. N., Dawane, B. S. Synthesis and Molecular Docking Studies of a New Series of Bipyrzazol-yl-thiazol-ylidene-hydrazinocarbothioamide Derivatives as Potential Antitubercular Agents. *Medicinal Chemistry Communications*, 2016, 7, 1405–1420.
- [2] Dawood, K. M., Abbas, A. A. Synthetic Routes to Bioactive Bipyrzazole Derivatives. *Chemistry Select*, 2021, 6 (3), 279–305.
- [3] Kalaria, P. N., Makawana, J. A., Satasia, S. P., Raval, D. K., Zhu, H.-L. Design, Synthesis and Molecular Docking of Novel Bipyrzazolyl Thiazolone Scaffold as a New Class of Antibacterial Agents. *Medicinal Chemistry Communications*, 2014, 5, 1555–1562.
- [4] Badr, M. H., Abd El Razik, H. A. 1,4-Disubstituted-5-hydroxy-3-methylpyrazoles and Some Derived Ring Systems as Cytotoxic and DNA Binding Agents. Synthesis, in Vitro Biological Evaluation and in Silico ADME Study. *Medicinal Chemistry Research*, 2018, 22, 442–457.
- [5] Ebenezer, O. *et al.* Antibacterial Evaluation and Molecular Docking Studies of Pyrazole-thiosemicarbazones and their Pyrazole-thiazolidinone Conjugates. *Molecular Diversity*, 2021 25, 191–204.
- [6] Arbačiauskienė, E., Martynaitis, V., Krikštolaitytė, S., Holzer, W., Šačkus, A. Synthesis of 3-Substituted 1-phenyl-1H-pyrazole-4-carbaldehydes and the Corresponding Ethanones by Pd-catalysed Cross-Coupling Reactions. *Archive for Organic Chemistry*, 2011, 11, 1–21.