

## ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

DOI: 10.15593/2224-9400/2022.1.06

УДК 615.31:615.011:519.6

**Е.В. Баньковская, Е.В. Костина, А.И. Чувызгалова**

Пермский национальный исследовательский  
политехнический университет, Пермь, Россия

### КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СВОЙСТВ И ПРОГНОЗ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2-АРИЛОКСИ-N-АЛКИЛЭТАНАМИНОВ

*Изучены некоторые молекулярные свойства новых производных 2-арилокси-N-алкилэтанаминов, находящихся на стадии планирования химического синтеза. С помощью веб-ресурса [chemicalize.org](http://chemicalize.org) определен ряд показателей: молекулярная масса, коэффициент распределения в системе октанол–вода ( $\log P$ ), площадь полярной поверхности, количество акцепторов водородной связи, количество доноров водородной связи, количество вращающихся связей, соответствие «правилу пяти» Липинского, фильтрам Muegge и Veber, lead likeness, биодоступность. Установлено, что все исследуемые соединения удовлетворяют «правилу пяти» Липинского по следующим параметрам: молекулярная масса  $\leq 500$ ; количество акцепторов водородной связи (не более 10 атомов кислорода и азота); количество доноров водородной связи (не более 5 атомов кислорода и азота с одним или двумя атомами водорода);  $\log P < 5$ . Обнаружено, что площадь полярной поверхности для производных 2-арилокси-N-алкилэтанаминов варьирует в пределах 25,48–51,8, молекулярная масса соединений 187,7–313,6 г/моль, количество доноров водородной связи составляет 1–2, количество акцепторов водородной связи 1–2, коэффициент распределения в системе октанол–вода ( $\log P$ ) изменяется от 0,461 до 2,380. Определено, что количество вращающихся связей исследуемых веществ изменяется от 4 до 5. Полученные данные о молекулярных свойствах соединений могут быть использованы при целенаправленном синтезе биологически активных веществ.*

*Результат прогноза спектра биологической активности представлен в PASS Online в виде упорядоченного списка названий соответствующих активностей и вероятностей  $P_a$  – «быть активным» и  $P_i$  – «быть неактивным» для прогнозируемого соединения. Это позволяет объединять в одной обучающей выборке информацию о биологически активных соединениях, собранную из многочисленных источников. Упорядочение списка выполнено по убыванию разности  $P_a - P_i$ , соответственно более вероятные виды активности находятся в начале спрогнозированного спектра.*

*В результате прогнозирования спектра биологической активности в системе PASS online было выявлено, что для производных 2-арилокси-N-алкилэтанаминов с высокой вероятностью экспериментального подтверждения прогнозируется наличие аналептического (34–77 %), местноанестезирующего (22–47 %) эффекта. Так-*

же для исследуемых соединений прогнозируется антидепрессантная активность, вероятность экспериментального подтверждения которой составляет 70–90 %.

**Ключевые слова:** арилоксиалкиламины, компьютерный анализ, количество доноров водородной связи, количество акцепторов водородной связи, коэффициент распределения в системе октанол-вода ( $\log P$ ), количество вращающихся связей, количество конденсированных ароматических колец, площадь полярной поверхности.

**E.V. Bankovskaya, E.V. Kostina, A.I. Chuvyzgalova**

Perm National Research Polytechnic University,  
Perm, Russian Federation

## **COMPUTER ANALYSIS OF MOLECULAR PROPERTIES AND PREDICTION OF THE BIOLOGICAL ACTIVITY OF SOME DERIVATIVES 2-ARYLOXY-N-ALKYLETHANAMINES**

*Some molecular properties of new derivatives of 2-aryloxy-N-alkylethanamines, which are at the planning stage of chemical synthesis, have been studied. Some indicators were determined by using the chemicalize.org web resource,: molecular weight, partition coefficient in the octanol-water system ( $\log P$ ), polar surface area, number of hydrogen bond acceptors, number of hydrogen bond donors, number of rotating bonds, compliance with the "rule of five" Lipinsky, Muegge and Veber filters, lead likeness, bioavailability. It has been established that all substances comply with Lipinski's "rule of five" in terms of the following parameters: molecular weight  $\leq 500$ ; the number of hydrogen bond acceptors (no more than 10 oxygen and nitrogen atoms); the number of hydrogen bond donors (no more than 5 oxygen and nitrogen atoms with one or two hydrogen atoms);  $\log P < 5$ . The polar surface area for derivatives of 2-aryloxy-N-alkylethanamines is varies in the range of 25.48-51.8. The compounds molecular weight varies in the range of 187.7-313.6 g/mol. The number of hydrogen bond donors is 1-2, the number of hydrogen bond acceptors is 1-2, the distribution coefficient in the octanol-water system ( $\log P$ ) varies from 0.461 to 2.380. It has been determined that the number of rotating bonds of the studied substances varies from 4 to 5. The obtained data on the molecular properties of the compounds can be used in the targeted synthesis of biologically active substances.*

*The result of the prediction of biological activity is presented in PASS Online as an ordered list of the names of the corresponding activities and the probabilities  $P_a$  - "to be active" and  $P_i$  - "to be inactive" for the predicted compound. This makes it possible to combine information on biologically active compounds collected from numerous sources in one training set. The list is sorted in descending order of the difference  $P_a - P_i$ , respectively, the more probable types of activity are at the beginning of the predicted spectrum*

*As a result of predicting the spectrum of biological activity in the PASS Online system, it was found for derivatives of 2-aryloxy-N-alkylethanamines, with a high probability of experimental confirmation, the presence of an analeptic effect (34-77 %), local anesthetic activity (22-47%) are predicted. Also, antidepressant activity is predicted for the studied compounds, the probability of experimental confirmation of which is 70-90 %.*

**Keywords:** aryloxyalkylamines, computer analysis, number of hydrogen bond donors, number of hydrogen bond acceptors, distribution coefficient in the octanol-water system ( $\log P$ ), number of rotating bonds, number of condensed aromatic rings, polar surface area.

**Введение.** Одним из приоритетных направлений в области современной фармацевтической химии является синтез соединений и исследование их биологической активности. Из источников литературы известно, что производные  $\omega$ -арилоксиалкиламинов проявляют различные виды фармакологической активности. Среди них обнаружены соединения, оказывающие влияние на сердечно-сосудистую систему, углеводный обмен. Вещества проявляют гипотензивную, местноанестезирующую, антиаритмическую, спазмолитическую, антигистаминную, антидепрессантную и противомикробную активности [1–9].

Скрининг новых потенциально активных веществ можно значительно ускорить путем использования компьютерных методов оценки фармакологических эффектов, таких как PASS Online [10, 11], исследованием количественной оценки «структура – активность» или «физико-химическое свойство – активность» [12]. Чаще всего используют такие свойства молекул, как коэффициент распределения в системе октанол – вода ( $\log P$ ), характеризующий липофильность молекул, от которой зависит всасывание, биодоступность, взаимодействие «вещество – рецептор», метаболизм, а также токсичность молекул [13].

Один из базовых критериев принятия решения о целесообразности химического синтеза вещества – удовлетворение структурной формулы «правилу пяти» Липинского [14]. Предложены к практическому использованию дополнительные фильтры, представляющие собой комплекс показателей, характеризующих молекулярные свойства соединений [15–17]:

1) биодоступность (молекулярная масса  $\leq 500$ ;  $\log P \leq 5$ ; количество доноров водородной связи  $\leq 5$ ; количество акцепторов водородной связи  $\leq 10$ ; количество вращающихся связей  $\leq 10$ ; площадь полярной поверхности (ППП)  $\leq 200$ ; количество конденсированных ароматических колец  $\leq 5$ );

2) lead likeness (лидероподобность) (молекулярная масса  $\leq 450$ ; количество доноров водородной связи  $\leq 5$ ; количество акцепторов водородной связи  $\leq 8$ ; количество вращающихся связей  $\leq 10$ ; количество конденсированных ароматических колец  $\leq 4$ );

3) фильтр Muegge (молекулярная масса 200–600;  $\log P$  от  $-2$  до  $5$ ; количество доноров водородной связи  $\leq 5$ ; количество акцепторов водородной связи  $\leq 10$ ; количество вращающихся связей  $\leq 15$ ; ППП  $\leq 150$ ; количество конденсированных ароматических колец  $\leq 7$ );

4) фильтр Veber (количество вращающихся связей  $\leq 10$ ; ППП  $\leq 140$ ).

Компьютерным моделированием обеспечивается база для последующего синтеза соединений с высоким потенциалом биологической активности. Поскольку прогноз выполняется по структурной формуле вещества, он может быть произведен уже на стадии планирования синтеза. Познание этих вопросов даст возможность проводить целенаправленный синтез биологически активных веществ.

**Экспериментальная часть.** Исследованы 26 производных 2-арилокси-N-алкилэтанаминов из виртуальной библиотеки, которые доступны для осуществления синтеза в лабораторных условиях (рисунок).

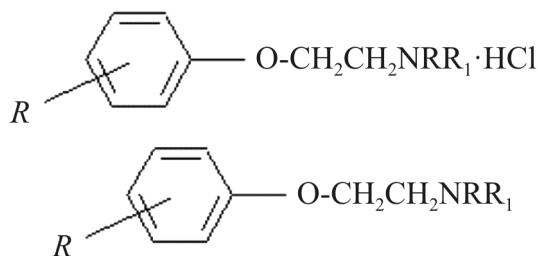


Рис. Структура анализируемых соединений

С привлечением веб-ресурса [chemicalize.org](http://chemicalize.org) [18] для каждого вещества определены молекулярная масса, количество доноров и акцепторов водородной связи, коэффициент распределения в системе октанол – вода ( $\log P$ ), количество вращающихся связей, количество конденсированных ароматических колец, а также площадь полярной поверхности (табл. 1). Количество вращающихся связей определяет молекулярную гибкость и служит одним из дескрипторов пероральной биодоступности соединения. ППП определяется как сумма площадей поверхности полярных атомов в молекуле и помогает прогнозировать транспортные свойства вещества [19].

В дальнейшем с помощью программного комплекса PASS Online была проведена оценка вероятности проявления разных видов биологической активности производных 2-арилокси-N-алкилэтанаминов.

**Результаты и обсуждение.** Основные показатели, рассчитанные для производных 2-арилокси-N-алкилэтанаминов, представлены в табл. 1.

Как видно из табл. 1, молекулярная масса соединений находится в пределах 187,7–313,6 г/моль, количество доноров водородной связи составляет 1–2, количество акцепторов водородной связи 1–2, коэффициент распределения в системе октанол – вода ( $\log P$ ) изменяется от 0,461 до 2,380, количество вращающихся связей 4–5, количество кон-

денсированных ароматических колец 1, площадь полярной поверхности от 25,48 до 46,07.

Таблица 1

Показатели, рассчитанные для гидрохлоридов  
2-арилокси-N-алкилэтанаминов

№ п/п	Молекулярная масса, г/моль	log P	Количество акцепторов водородной связи	Количество доноров водородной связи	Площадь полярной поверхности	Количество вращающихся связей
1	201,7	1,808	1	1	25,84	5
2	187,7	1,451	1	1	25,84	4
3	222,2	2,055	1	1	25,84	4
4	222,2	2,055	1	1	25,84	4
5	222,2	2,055	1	1	25,84	4
6	201,7	1,965	1	1	25,84	4
7	201,7	1,965	1	1	25,84	4
8	201,7	1,965	1	1	25,84	4
9	202,7	0,622	2	2	51,86	4
10	202,7	0,622	2	2	51,86	4
11	202,7	0,622	2	2	51,86	4
12	248,6	2,220	1	1	25,48	4
13	248,6	2,220	1	1	25,48	4
14	248,6	2,220	1	1	25,48	4
15	205,7	1,594	1	1	25,84	4
16	205,7	1,594	1	1	25,48	4
17	205,7	1,594	1	1	25,48	4
18	313,6	2,380	1	1	25,84	4
19	313,6	2,380	1	1	25,84	4
20	313,6	2,380	1	1	25,84	4
21	203,7	0,716	2	2	46,07	4
22	203,7	0,431	2	2	46,07	4
23	203,7	0,691	2	2	46,07	4
24	219,8	1,060	1	2	25,84	4
25	219,8	1,057	1	2	25,84	4
26	219,8	1,058	1	2	25,84	4

Результаты оценки соответствия формул выбранным фильтрам приведены в табл. 2.

Все исследуемые соединения удовлетворяют «правилу пяти» Липпинского по следующим параметрам: молекулярная масса  $\leq 500$ ; количество акцепторов водородной связи (не более 10 атомов кислорода и азота); количество доноров водородной связи (не более 5 атомов кислорода и азота с одним или двумя атомами водорода);  $\log P < 5$ .

Только соединение 2, у которого отсутствуют заместители в бензольном кольце, не прошло испытания по параметру «фильтр Muegge».

Таблица 2

Результаты компьютерного анализа для гидрохлоридов  
2-арилокси-N-алкилетанаминов

№ п/п	Соответствие «правилу пяти» Липинского	Биодоступность	Lead likeness	Фильтр Muegge	Фильтр Veber
1	+	+	+	+	+
2	+	+	+	---	+
3	+	+	+	+	+
4	+	+	+	+	+
5	+	+	+	+	+
6	+	+	+	+	+
7	+	+	+	+	+
8	+	+	+	+	+
9	+	+	+	+	+
10	+	+	+	+	+
11	+	+	+	+	+
12	+	+	+	+	+
13	+	+	+	+	+
14	+	+	+	+	+
15	+	+	+	+	+
16	+	+	+	+	+
17	+	+	+	+	+
18	+	+	+	+	+
19	+	+	+	+	+
20	+	+	+	+	+
21	+	+	+	+	+
22	+	+	+	+	+
23	+	+	+	+	+
24	+	+	+	+	+
25	+	+	+	+	+
26	+	+	+	+	+

Результат прогноза спектра биологической активности представлен в PASS в виде упорядоченного списка названий соответствующих активностей и вероятностей  $P_a$  – «быть активным» и  $P_i$  – «быть неактивным» для прогнозируемого соединения. Это позволяет объединять в одной обучающей выборке информацию о биологически активных соединениях, собранную из многочисленных источников. Упорядочение списка выполнено по убыванию разности  $P_a - P_i$ , соответственно более вероятные виды активности находятся в начале спрогнозированного спектра.

В результате прогнозирования спектра биологической активности в системе PASS Online было выявлено, что для производных 2-арилокси-N-алкилэтанаминов с высокой вероятностью экспериментального подтверждения прогнозируется наличие аналептического (34–77 %), местноанестезирующего (22–47 %) эффекта. Также для исследуемых соединений прогнозируется антидепрессантная активность, вероятность экспериментального подтверждения которой составляет 70–90 %.

### Список литературы

1. Семеновых Е.В. Синтез, свойства и биологическая активность 2-арилокси-N-алкил- и -N,N-диалкилэтанаминов: автореф. дис. ... канд. фарм. наук (15.00.02; 14.00.25) / Перм. гос. фарм. акад. – Пермь, 2006. – 20 с.
2. Синтез и противомикробная активность производных 2-арилокси-N,N-диэтилэтанамин / Е.В. Семеновых, В.И. Панцуркин, В.В. Новикова, Т.Ф. Одегова, Б.Я. Сыропятов, М.И. Вахрин // Химико-фармацевтический журнал. – 2007. – Т. 41, № 4. – С. 33–36.
3. Баньковская Е.В., Тонкоева И.В. Исследование корреляционной зависимости гипотензивной активности веществ от липофильных констант заместителей // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Химическая технология и биотехнология. – 2019. – № 1. – С. 13–21.
4. Patent 103484 USA. Certain 3-substituted 2-alkyl benzofuran derivatives. Kennedy T.P. Pend. 30.09.87; Publ. 25.07.89.
5. Patent 383998 Switzerland. Verfahren zur Herstellung neuer sekundärer Amine. Druey J., Schenker K. Pend. 5.08.59; Publ. 29.01.65.
6. Patent 6300368 USA. Anilide derivatives and antiarrhythmic agents containing the same. МПК<sup>7</sup> А 61 К 31/166, А 61 К 31/341. Yamashita H., Togashi K., Kai A., Mohri J. [et all.]. № 09/340022. Pend. 28.06.99; Publ. 09.10.01.
7. Patent 390943 Switzerland. Verfahren zur Herstellung neuer sekundärer Amine. Schenker K. Pend. 18.12.59; Publ. 31.08.65.
8. Patent 371458 Switzerland. 12q, 14/04. Verfahren zur Herstellung neuer sekundärer Amine. Druey J., Schenker K. Pend. 02.10.58; Publ. 15.10.63.
9. Patent 4024282 USA, 424-330, (A 61 K 31/135). Pharmaceutically active 2-(3-Alkylaminopropoxy)diphenylmethanes. Kikumoto R., Tobe A., Tonomura S., Ikoma H. № 635147. Pend. 25.11.75; Publ. 17.05.77.
10. Predictive services PASS online. – URL: <http://www.way2drug.com/PassOnline/predict.php> (accessed 23 January 2022).
11. Компьютерный прогноз спектров биологической активности органических соединений: возможности и ограничения / В.В. Поройков, Д.А. Фи-

лимонов, Т.А. Глориозова [и др.]. // Известия академии наук. Сер. Химическая. – 2019. – № 12. – С. 2143–2154.

12. Баньковская Е.В., Тонкоева И.В., Мишарин К.Д. Синтез и исследование местноанестезирующей активности 2-арилокси-N-алкилетанаминов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Химическая технология и биотехнология. – 2021. – № 4. – С. 70–80. DOI: 10.15593/2224-9400/2021.4.06

13. Раевский О.А. Дескрипторы молекулярной структуры в компьютерном дизайне биологически активных веществ // Успехи химии. – 1999. – Т. 68, № 6. – С. 555–575.

14. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings / C.A. Lipinski, F. Lombardo, B.W. Dominy, P.J. Feeney // *Adv. Drug Discovery Rev.* – 1997. – Vol. 23, no. 1–3. – P. 3–25.

15. Липатников К.В., Пулина Н.А., Собин Ф.В. Компьютерный анализ молекулярных свойств новых производных бензо[d]тиазола и 1,3,4-тиадиазола // Химия в интересах устойчивого развития. – 2016. – Т. 24, № 5. – С. 693–697. DOI: 10.15372/KhUR20160514

16. Ghose A.K., Viswanadhan V.N., Wendoloski J.J. A knowledge-based approach in designing combinatorial or medicinal chemistry libraries for drug discovery. 1. A qualitative and quantitative characterization of known drug databases // *J. Comb. Chem.* – 1999. – Vol. 1, no. 1. – P. 55–68.

17. Molecular properties that influence the oral bioavailability of drug candidates / D.F. Veber, S.R. Johnson, H.-Y. Cheng, B.R. Smith, K.W. Ward, K.D. Kopple // *J. Med. Chem.* – 2002. – Vol. 45, no. 12. – P. 2615–2623.

18. Chemicalize.org by ChemAxon. – URL: <http://www.chemicalize.org> (accessed 13 December 2021).

19. Ertl P., Rohde B., Selzer P. Fast Calculation of Molecular Polar Surface Area as a Sum of Fragment-Based Contributions and Its Application to the Prediction of Drug Transport Properties// *J. Med. Chem.* – 2000. – Vol. 43, no. 20. – P. 3714–3717.

## References

1. Semenovykh E.V. Sintez, svoistva i biologicheskaja aktivnost' 2-ariloksi-N-alkil- i -N,N-dialkiletanaminov [Synthesis, properties and biological activity of 2-aryloxy-N-alkyl- and -N,N-dialkylethanamines]. Abstract of Ph. thesis. Perm, 2006, 20 p.

2. Semenovykh E.V., Pantsurkin V.I., Novikova V.V., Odegova T.F., Syropiatov B.Ia., Vakhurin M.I. Sintez i protivomikrobnaja aktivnost' proizvodnykh 2-ariloksi-N,N-dietiletanamina [Synthesis and antimicrobial activity of 2-aryloxy-N,N-diethylethanamine derivatives]. *Khimiko-farmatsevticheskii zhurnal*, 2007, Vol. 41, no. 4. – pp. 33–36.



3. Ban'kovskaia E.V., Tonkoeva I.V. Issledovanie korreliatsionnoi zavisimosti gipotenzivnoi aktivnosti veshchestv ot lipofil'nykh konstant zamestitelei [Research of correlation dependence of hypotensive activity of substances on lipophilic constants of substituents]. *Vestnik PNIPU, Khimicheskaiia tekhnologiia i biotekhnologiia*, 2019, no. 1, pp. 13-21.
4. Pat. 103484 USA, Certain 3-substituted 2-alkyl benzofuran derivatives.. Kennedy T.P. Pend. 30.09.87; Publ. 25.07.
5. Pat. 383998 Switzerland, Verfahren zur Herstellung neuer sekundärer Amine. Druey, J., Schenker K. Pend. 5.08.59; Publ. 29.01.65.
6. Pat. 6300368 USA, Anilide derivatives and antiarrhythmic agents containing the same. МПК <sup>7</sup> A 61 K 31/166, A 61 K 31/341. Yamashita H., Togashi K., Kai A., Mohri J. et al. № 09/340022. Pend. 28.06.99; Publ. 09.10.01.
7. Pat. 390943 Switzerland. Verfahren zur Herstellung neuer sekundärer Amine. Schenker K. Pend. 18.12.59; Publ. 31.08.65.
8. Pat. 371458 Switzerland, 12q, 14/04. Verfahren zur Herstellung neuer sekundärer Amine. Druey J., Schenker K. Pend. 02.10.58; №; Publ. 15.10.63.
9. Pat. 4024282 USA, 424-330, (A 61 K 31/135). Pharmaceutically active 2-(3-Alkylaminopropoxy)diphenylmethanes. Kikumoto R., Tobe A., Tonomura S., Ikoma H. Pend. 25.11.75; №635147; Publ. 17.05.77.
10. Predictive services PASS online, available at: <http://www.way2drug.com/PassOnline/predict.php> (accessed 23 January 2022).
11. Poroikov V.V., Filimonov D.A., Glorizova T.A., Lagunin A.A., Druzhilovskii D.S., Rudik A.V., Stolbov L.A., Dmitriev A.V., Tarasova O.A., Ivanov S.M., Pogodina P.V. Komp'uternyi prognoz spektrov biologicheskoi aktivnosti organicheskikh soedinenii: Vozmozhnosti i ogranicheniia [Computer-aided prediction of biological activity spectra for organic compounds: the possibilities and limitations]. *Izvestiia akademii nauk. Ser. Khimicheskaiia*, 2019, no. 12, pp. 2143-2154.
12. Ban'kovskaia E.V., Tonkoeva I.V., Misharin K.D. Sintez i issledovanie mestnoanesteziruiushchei aktivnosti 2-ariloksi-N-alkiletanaminov [Synthesis and investigation of local anesthetic activity of 2-ariloxy-N-alkylethanamines]. *Vestnik PNIPU, Khimicheskaiia tekhnologiia i biotekhnologiia*, 2021, no. 4, pp. 70-80.
13. Raevskij O.A. Deskriptory molekul'arnoj struktury v komp'juternom dizajne biologicheskii aktivnykh veshchestv [Molecular structure descriptors in computer design of biologically active substances]. *Uspehi himii*, 1999, vol. 68, no. 6, pp. 555–575.
14. Lipinski C.A., Lombardo F., Dominy B.W., Feeney P.J. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings // *Adv. Drug Discovery Rev.* 1997. Vol. 23, No. 1-3. P. 3-25.
15. Lipatnikov, K.V., Pulina N.A., Sobin F.V. Komp'uternyi analiz molekuliarnykh svoistv novykh proizvodnykh benzo[d]tiazola i 1,3,4-tiadiazola [Computer analysis of molecular properties of new derivatives of benzo[d]thiazole

and 1,3,4-thiadiazole]. *Khimiia v interesakh ustoichivogo razvitiia*, 2016, Vol. 24, no. 5, pp. 693-697.

16. Ghose A.K., Viswanadhan V.N., Wendoloski J.J. A knowledge-based approach in designing combinatorial or medicinal chemistry libraries for drug discovery. 1. A qualitative and quantitative characterization of known drug databases // *J. Comb. Chem.* 1999/ Vol. 1, No. 1. P. 55-68.

17. Veber D.F., Johnson S.R., Cheng H.-Y., Smith B.R., Ward K.W., Kopple K.D. Molecular properties that influence the oral bioavailability of drug candidates // *J. Med. Chem.* 2002. Vol. 45, No. 12. P. 2615-2623.

18. Chemicalize.org by ChemAxon, available at: <http://www.chemicalize.org> (accessed 13 December 2021).

19. Ertl P., Rohde B., Selzer P. Fast Calculation of Molecular Polar Surface Area as a Sum of Fragment-Based Contributions and Its Application to the Prediction of Drug Transport Properties // *J. Med. Chem.* 2000. Vol. 43, No. 20. P. 3714-3717.

### **Об авторах**

**Баньковская Екатерина Владимировна** (Пермь, Россия) – кандидат фармацевтических наук, доцент кафедры «Химические технологии» Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29; e-mail: [albit2302@mail.ru](mailto:albit2302@mail.ru)).

**Костина Елена Владимировна** (Пермь, Россия) – старший преподаватель кафедры «Высшая математика» Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29; e-mail: [sta73858280@yandex.ru](mailto:sta73858280@yandex.ru)).

**Чувызгалова Александра Ивановна** – студентка факультета химических технологий, промышленной экологии и биотехнологий Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., e-mail: [tveritina2001@gmail.com](mailto:tveritina2001@gmail.com)).

### **About the authors**

**Ekanerina V. Bankovskaya** (Perm, Russian Federation) – Ph.D. in Pharmacy, Associate Professor of the Department of Chemical Technologies, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990; e-mail: [albit2302@mail.ru](mailto:albit2302@mail.ru)).

**Elena V. Kostina** (Perm, Russian Federation) – Senior lecturer, Department of Mathematics, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990; e-mail: [sta73858280@yandex.ru](mailto:sta73858280@yandex.ru)).

**Alexandra I. Chuvyagalova** (Perm, Russian Federation) – Student, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, e-mail: [tveritina2001@gmail.com](mailto:tveritina2001@gmail.com)).

Поступила: 27.01.2022

Одобрена: 02.02.2022

Принята к публикации: 15.03.2022

**Финансирование.** Исследование не имело спонсорской поддержки.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Вклад авторов** равноценен.

Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:

Баньковская Е.В., Костина Е.В., Чувызгалова А.И. Компьютерный анализ молекулярных свойств и прогноз биологической активности некоторых производных 2-арилокси-N-алкилетанаминов // Вестник ПНИПУ. Химическая технология и биотехнология. – 2022. – № 1. – С. 77–87.

Please cite this article in English as:

Bankovskaya E.V., Kostina E.V., Chuvyzgalova A.I. Computer Analysis of Molecular Properties and Prediction of the Biological Activity of Some Derivatives 2-aryloxy-N-alkylethanamines. *Bulletin of PNRPU. Chemical Technology and Biotechnology*, 2022, no. 1, pp. 77-87 (In Russ).