Kinurénsav-imid vegyületek szintézise és *in silico* vizsgálata

Synthesis and *in silico* study of kynurenic acid–imide analogues

TÖRTELI Levente[1], SIMON Péter[1], SZATMÁRI István*[1,2]

[1] SZTE GYTK Gyógyszerkémiai Intézet,
Eötvös u. 6., 6720 Szeged, Magyarország

[2] HUN–REN SZTE Stereochemistry Research Group, University of Szeged,
Eötvös u. 6, H-6720 Szeged, Hungary

*szatmari.istvan@szte.hu

ABSTRACT

Kynurenic acid (KYNA) is a metabolic product of L-tryptophan in humans. KYNA is endogenous ligand of numerous receptors and its local concentration in the central nervous system correlates with several neurodegenerative diseases (e.g. Parkinson's disease, Alzheimer's disease, schizophrenia, migraine). Due to the neuroprotective effect of KYNA, it is important to investigate how its' analogues act to find the molecule with the best pharmacological properties.

Our aim was to synthesize KYNA analogues from isatoic anhydride that are 2,3-dicarboxylic acid esters. These diesters were treated with amines in order to form imide compounds. With the new imide compounds *in silico* docking study was made to investigate their antagonism on NMDA receptor.

Keywords: kynurenic acid, KYNA, neuroprotective, *in silico*, NMDA antagonist

ÖSSZEFOGLALÓ

A kinurénsav (KYNA) az emberi szervezetben az L-triptofán metabolikus terméke. A vegyület több receptor endogén ligandja, illetve lokális koncentrációja a központi idegrendszerben több neurodegeneratív megbetegedéssel is korrelációt mutat (pl.: Parkinson-kór, Alzheimer-kór, skizofrénia, migrén). A KYNA neuroprotektív hatása miatt ígéretes vegyület és érdemes minél több származékát vizsgálni annak érdekében, hogy a lehető legjobb farmakológiai tulajdonságokkal rendelkező molekulát megtalálhassuk.

Célunk olyan KYNA analóg molekulák szintézise volt antranil-anhidridből kiindulva, amelyek 2,3-dikarbonsav észterek. Majd ezeket a diésztereket reagáltattuk aminokkal annak érdekében, hogy imideket állítsunk elő. Az újonnan szintetizált imideket *in silico* modellezéssel vizsgáltuk, hogy azok NMDA receptor antagonistaként viselkednek-e.

Kulcsszavak: kinurénsav, KYNA, neuroprotektív, *in silico*, NMDA antagonista

