

Молекулярний дизайн функціоналізованих похідних 1,2,4-тріазол-3-тіонів

Голік В.В., Єрьоміна Г.О.

Кафедра медичної хімії

Національний фармацевтичний університет, м. Харків, Україна

vgolik543@gmail.com

Останнім часом зменшилось надходження нових лікарських засобів на ринок, що можна пояснити багатьма різними факторами. Один з найбільш вагомих – це поява великої кількості вимог щодо безпеки та ефективності лікарських засобів, а також те, що вартість проведення досліджень є досить великою та невпинно збільшується з кожним роком.

Тому на сьогодні все більш актуальним стає комп'ютерне моделювання, яке покликане зменшити витрати на пошук та розробку нових лікарських засобів. Сучасні комп'ютерні технології знайшли широке застосування у фармації. Комп'ютерне моделювання є важливим засобом дослідження складних процесів і систем, на якому базуються сучасні підходи до оптимізації та управління у фармації. Використання методів математичного моделювання за допомогою комп'ютерних технологій дає змогу значно підвищити ефективність опрацювання результатів досліджень шляхом виключення неперспективних сполук з несприятливими властивостями і заздалегідь попередити синтез дорогівартісних хімічних сполук.

На сьогодні похідні 1,2,4-тріазолу широко використовуються у фармації. Ядро 1,2,4-тріазолу є основою багатьох лікарських засобів різної спрямованості дії: протигрибкових (флуконазол, інтраконазол), антидепресантних (тразодон, альпразолам), гепатопротекторів (тіотриазолін), протипухлинних (анастрозол, летрозол) та ін. Це обумовлює інтерес до пошуку нових біологічно активних речовин серед похідних 1,2,4-тріазолу.

Метою нашої роботи було комп'ютерне моделювання синтезованих на кафедрі медичної хімії НФаУ нових похідних 1,2,4-тріазолу, що містять піперидиновий та морфоліновий фрагменти.

Комп'ютерний прогноз біологічної активності та побічних дій тестованих сполук здійснено за структурною формулою сполук за допомогою безкоштовного веб-сервісу Way2Drug, *online*-програм «All Activities» та «Adverse Effects & Toxicity» програмного пакету PASS. За результатами *in silico* дослідження біологічної активності всі сполуки мають високу вірогідність прояву знеболюючої дії (Pa від 0.792 до 0.360), здатні бути блокаторами кальцієвих каналів (Pa 0.654 - 0.614) та можуть бути використані для лікування атеросклерозу (Pa 0.504 - 0.473). Прогнозованою побічною дією всіх сполук з вірогідністю (Pa 0.453-0.317) може бути седативна дія.

Отже, проведені *in silico* дослідження біологічної активності та побічних дій нових

похідних 1,2,4-тріазолу з піперидиновим та морфоліновим фрагментами свідчить про перспективність проведення фармакологічних випробувань всіх тестованих сполук на наявність знеболюючої активності.

Стандартизація густого ліпофільного екстракту із трави маруни дівочої

Гордей К.Р., Гонтова Т.М.

Кафедра ботаніки

Національний фармацевтичний університет, м. Харків, Україна

95karisha95@gmail.com

Маруна дівоча (*Tanacetum parthenium* (L.) Schultz Bip.) – це перспективний офіційний вид роду *Tanacetum*. Сесквітерпенові лактони є домінуючими сполуками сировини, що обумовлюють антимігренозну, анальгетичну та протипухлинну активності [1]. Основним сесквітерпеновим лактоном є партенолід (понад 85 %). За результатами наших досліджень серій трави маруни дівочої вміст партеноліду варіював від 0,16 до 0,39 %. З метою їх вилучення було розроблено технологію отримання ліпофільного екстракту, який отримували із шроту після отримання спиртового екстракту. Для подальшого дослідження отриманого екстракту та вивчення його біологічної активності актуальним є його стандартизація.

Матеріали і методи. Об'єктом дослідження був густий ліпофільний екстракт трави маруни дівочої. Для визначення якісного складу і кількісного вмісту партеноліду використовували методику ДФУ, наведену у монографії «Маруни дівочої трава» [2]. Для визначення сухого залишку, втрати в масі при висушуванні, мікробіологічної чистоти та вмісту важких металів використовувались загальні статті ДФУ.

Результати та їх обговорення. В результаті ідентифікації партеноліду час утримання відповідав часу утримання відповідному піку розчину порівняння партеноліду (~16,37 хв). За результатами кількісного визначення вміст партеноліду у досліджуваному екстракті склав 6,48 %. Сухий залишок досліджуваного екстракту склав 91,6 %, втрата в масі при висушуванні – 9,3 %. За показниками мікробіологічної чистоти та вмістом важких металів густий ліпофільний екстракт із трави маруни дівочої відповідав вимогам ДФУ.

Висновки. За результатами проведених досліджень було стандартизовано густий ліпофільний екстракт трави маруни дівочої. В подальшому планується дослідження його біологічної активності та розробка лікарського рослинного засобу на основі даної субстанції.