

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ І.Я. Горбачевського**



**НАУКОВО-ТЕХНІЧНИЙ ПРОГРЕС  
І ОПТИМІЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ  
ПРОЦЕСІВ СТВОРЕННЯ  
ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТІВ**

**МАТЕРІАЛИ VII НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ  
КОНФЕРЕНЦІЇ  
З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ**

*27 - 28 вересня 2018 р.*

Тернопіль  
ТДМУ  
«Укрмедкнига»  
2018

УДК 615.1

Редакційна колегія: проф. Кліщ І.М., проф. Грошовий Т.А., проф. Марчишин С.М., проф. Фіра Л.С., доц. Вронська Л.В., доц. М.Б., доц. Чубка М.Б., ас. Дуб А.І., асп. Вонс Б.В.

Науково-технічний прогрес і оптимізація технологічних процесів створення лікарських препаратів: матеріали VII наук.-практ. конф. з міжнар. участю (27-28 вересня 2018 р.). – Тернопіль : ТДМУ, 2018. – 384 с.

Для синтезованих сполук досліджено протизапальну активність на моделі карагенінового набряку лапи у щурів. Отримані результати дозволили ідентифікувати сполуку **3f** з виразним антиексудативним ефектом (37,5%), що є співмірним з еталонними засобами «Диклофенак натрію» (43,6%) та «Кетанов» (38,6%).

## **ДОКІНГОВІ ДОСЛІДЖЕННЯ ПОХІДНИХ 2-ІМІНО-1,3-ТІАЗОЛІНУ ТА 1,3,4-ТІАДІАЗОЛУ ЯК ПОТЕНЦІЙНИХ КАРДІОПРОТЕКТОРІВ**

**І.В. Драпак<sup>1</sup>, Б.С. Зіменковський<sup>1</sup>, Л.О. Перехода<sup>2</sup>,  
М.В. Протопопов<sup>2</sup>**

*Львівський національний медичний університет  
імені Данила Галицького<sup>1</sup>,  
Національний фармацевтичний університет<sup>2</sup>,  
iradrapak@ukr.net*

Використання молекулярного докінгу, тобто тривимірного суміщення(стикування) структури з порожниною рецептора-мішені, в значній мірі дозволяє визначити афінітет сполук до певної біологічної мішені та здійснити відбір сполук, для яких прогнозується певний вид біологічної активності, при якому враховується специфічність взаємодії сполуки із відповідною мішенню. Фермент гамма-бутиробетаїнгідроксилаза каталізує процес перетворення гамма-бутиробетаїну в карнітин, що, в свою чергу, призводить до розслаблення гладких м'язів судин, поліпшенню мікроциркуляції та ендотеліальної функції. Всі ці процеси дуже важливі при патології серцево-судинної системи.

Метою дослідження є проведення рецепторно-орієнтованого віртуального скринінгу похідних 2-іміно-1,3-тіазоліну та 1,3,4-тіадіазолу до активного центру гамма-бутиробетаїнгідроксилази (PDBID: 3O2G) з метою спрямованого пошуку інгібіторів цього ферменту як потенційних кардіопротекторних засобів метаболічної дії.

Для рецепторно-орієнтованого гнучкого докінгу використовували пакет програм Autodock 4.2.6. Підготовка лігандів проводилася за допомогою програм Vega ZZ (command line) та MGL Tools 1.5.6. Для

визначення основних взаємодій було проведено докінг в активний центр гамма-бутиробетаїнгідроксилази референс препаратів мілдронату та L-карнітину. Потім, за таких самих умов, було проведено докінг всіх сполук досліджуваної вибірки. Всі результати були ранжовані скоринговою функцією програми Autodock 4.2.6 та візуально оцінені за наявністю ключових взаємодій із активним сайтом ферменту гамма-бутиробетаїнгідроксилази.

За результатами докінгу похідні 2-іміно-1,3-тіазоліну, що містять у своїй структурі гідроксиетиловий, метилпіперазиновий, етилморфоліновий, пропілморфоліновий, триазолоазепіновий, етильний фрагменти та 2,5-дизаміщені похідні 1,3,4-тіадіазолу мають вираховані значення афінності до фермента співмірні зі значеннями класичних інгібіторів, що є аргументом для вивчення *in vivo* метаболічної дії 18 перспективних сполук.

## **ВИВЧЕННЯ ГІПОГЛІКЕМІЧНОЇ АКТИВНОСТІ СЕРЕД СОЛЕЙ 2-((4-R-5-ФЕНЕТИЛ-4H-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІЛ)ТІО)ОЦТОВОЇ (ПРОПАНОВОЇ, БЕНЗОЙНОЇ) КИСЛОТ**

**Т.В. Ігнатова, А.Г. Каплаушенко, Ю.С. Фролова**

*Запорізький державний медичний університет  
yuliia\_hulina@ukr.net*

Однією з глобальних проблем медико-соціальних проблем є захворювання на цукровий діабет. Сьогодні на фармацевтичному ринку найбільш популярними серед цукрознижуючих препаратів є гліклазид, глібенкламід, глімепірид. Всі вищезазначені препарати мають ряд побічних ефектів. Тому актуальним є пошук речовин, які б мали високу гіпоглікемічну активність та не проявляли побічних ефектів.

Дослідження гіпоглікемічної активності синтезованих сполук серед солей 2-((4-R-5-фенетил-4H-1,2,4-тріазол-3-іл)тіо)оцтової (пропанової, бензойної) кислот та встановлення закономірностей взаємозв'язку «структура-активність».

В якості тест-системи були використані щури-самці лінії Wistar, масою 160-220 г. Скринінг проводили на тваринах, які протягом