



Національна академія наук України

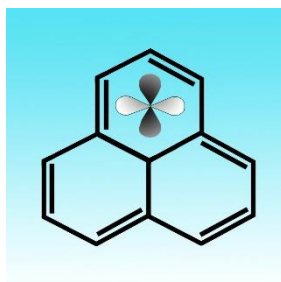


Міністерство освіти та науки України

Державна наукова установа
«Науково-технологічний
комплекс «Інститут
монокристалів»

Харківський національний
університет
імені В.Н. Каразіна

За підтримки Enamine Ltd



**ХІІІ ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ ТА СТУДЕНТІВ
З АКТУАЛЬНИХ ПИТАНЬ ХІМІЇ**

Збірка праць

Харків
2-4 травня 2018 року

ББК 24 УКР-РОС
Г24

Г24

ХІІІ Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань хімії. Збірка праць. – м. Харків: Ексклюзив, 2018. – 96 стор.

ISBN 978-617-7204-71-7

© ДНУ НТК ІМК НАНУ, 2018

Програмний комітет:

- Чебанов Валентин Анатолійович, член-кореспондент НАН України, голова
- Десенко Сергій Михайлович, д.х.н., проф., голова секції органічної хімії та хімії природних сполук
- Чергінець Віктор Леонідович, д.х.н., проф., голова секції фізичної та неорганічної хімії
- Беліков Костянтин Миколайович, к.х.н., голова секції аналітичної хімії та матеріалознавства
- Дорошенко Андрій Олегович, д.х.н., проф.
- Мчедлов-Петросян Микола Отарович, член-кореспондент НАН України,
- Ліпсон Вікторія Вікторівна, д.х.н., проф.
- Калугін Олег Миколайович, к.х.н., проф.

Організаційний комітет:

- Щербаков І.Б., к.х.н.. голова
- Мурликіна М.В., к.х.н. – секретар
- Буніна З.Ю.
- Михайленко В.В.
- Звягін Є.М.
- Сіденко О.О.
- Семененко О.М.
- Санін Е.В.
- Говор І.В.

ДОКІНГОВІ ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНІЗМУ ДІЇ ПОТЕНЦІЙНОГО АНТИКОНВУЛЬСАНТУ N-(5-ЕТИЛ-[1,3,4]ТІАДІАЗОЛ-2-ІЛ)- НІТРОБЕНЗАМІДУ

ПЕРЕХОДА Л.О., Сич І.В., Сич І.А., ГРІНЕВИЧ Л.О., ЄРЬОМІНА З.Г.,
РАХІМОВА М.В.

Національний фармацевтичний університет, Харків, Україна
grinevich.lina@gmail.com

Згідно з результатами фармакологічного скринінгу синтезована на кафедрі медичної хімії НФаУ сполука N-(5-етил-[1,3,4]тіадіазол-2-іл)-нітробензамід у дозі 50 мг/кг проявляє антиконвульсивний ефект. Метою даного дослідження є оцінювання *in silico* афінитету N-(5-етил-[1,3,4]тіадіазол-2-іл)-нітробензаміду до протисудомної біомішені та висунення гіпотези щодо можливого механізму його дії. За наявності подібних структурних фрагментів найбільш вірогідним ми передбачали ГАМК ергічний механізм дії. З метою оцінювання *in silico* афінитету до ГАМК_A рецептора використовували пакет програм Autodock 4.2.6. Підготовка лігандів для рецепторно-орієнтованого гнучкого докінгу проводилася за допомогою програм Vega ZZ та MGL Tools 1.5.6. Для докінгових досліджень була використана кристалографічна структурна модель ГАМК_A рецептора з Protein DataBank (PDB код 1GNU). Докінг сполук порівняння фенобарбіталу та карбамазепіну, що діють за ГАМК ергічним механізмом, та досліджуваної сполуки проводився в активний сайт, що був вибраний згідно публікації Yvonne Thielmann (2008) (Рис.1).

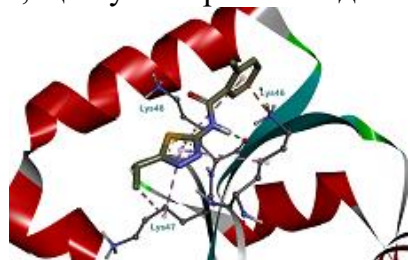


Рис.1 N-(5-етил-[1,3,4]тіадіазол-2-іл)-нітробензамід в активному сайті протеїну ГАМК_A рецептора (PDB ID: 1GNU).

Проведені розрахунки показали, що взаємодія досліджуваної молекули з активним сайтом-мішені 1GNU аналогічна вже відомим лігандам, що чинять відповідний фармакологічний ефект. У результаті докінгу одержані значення оцінювальних скорингових функцій фенобарбіталу (-4.75), карбамазепіну (-5.37) та N-(5-етил-[1,3,4]тіадіазол-2-іл)-нітро-бензаміду (-5.72). Співмірні величини скорингових функцій референс препаратів і досліджуваної сполуки свідчать про термодинамічну ймовірність та енергетичну сприятливість утворення комплексів між молекулою досліджуваної речовини та зазначеним рецептором та можуть бути аргументом на користь ГАМК ергічного механізму дії синтезованої сполуки.