



Міністерство охорони здоров'я України
Тернопільський національний медичний
університет імені І. Я. Горбачевського
Міністерства охорони здоров'я України

**Матеріали X науково-практичної
конференції з міжнародною участю**

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

**присвячена пам'яті завідувача кафедри
управління та економіки фармації з
технологією ліків, доктора
фармацевтичних наук, професора
Тараса Андрійовича Грошового**

17-18 жовтня 2024 року

ДОСЛІДЖЕННЯ АНТИОКСИДАНТНОЇ АКТИВНОСТІ ПОХІДНИХ 5-(2,4-, 3,4-ДИМЕТОКСИФЕНІЛ)-3H-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОНІВ ЗА ДОПОМОГОЮ ДОКІНГОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

Довбня Д., Каплаушенко А.
Запорізький державний медико-фармацевтичний університет,
м. Запоріжжя, Україна
dima.dovbnya@ukr.net

Актуальність. Похідні 1,2,4-тріазолу є перспективними сполуками для розробки нових лікарських засобів завдяки їх широкому спектру біологічної активності. Синтез нових сполук на основі тріазолів із замісниками, що мають метоксифенільні групи, дозволяє розширити можливості їх використання у фармакології. Докінгові дослідження є ефективним інструментом для передбачення взаємодії цих похідних із ферментами та білками, що відповідають за оксидативний стрес, дозволяючи оцінити їх антиоксидантний потенціал ще на стадії комп'ютерного моделювання.

Мета роботи. Дослідити антиоксидантну активність похідних 5-(2,4-, 3,4-диметоксифеніл)-3H-1,2,4-тріазол-3-тіонів за допомогою докінгових досліджень та оцінити їх потенціал як інгібіторів ключових ферментів оксидативного стресу.

Матеріали та методи. Для проведення докінгових досліджень використовували програмне забезпечення AutoDock Vina. Моделями-мішенями обрано ферменти, що беруть участь в оксидативному стресі, зокрема супероксиддисмутази (SOD) та каталазу. Структури досліджуваних сполук оптимізовано за допомогою квантово-хімічних методів. Оцінка зв'язування та стабільності комплексу «ліганд-білок» проводилася за енергією зв'язку та взаємодією функціональних груп з активним центром ферментів.

Результати. Докінгові дослідження показали, що більшість похідних 5-(2,4-, 3,4-диметоксифеніл)-3H-1,2,4-тріазол-3-тіонів проявляють значну спорідненість до активних центрів SOD та каталази, що свідчить про їх потенційні антиоксидантні властивості. Найбільш перспективними виявилися похідні з 2,4-диметоксифенільною групою, які продемонстрували найнижчу енергію зв'язування з SOD. Також спостерігалася стабільна взаємодія з амінокислотними залишками активного центру ферментів, що вказує на можливість їх ефективного інгібування.

Висновки. Отримані результати докінгових досліджень підтверджують перспективність похідних 5-(2,4-, 3,4-диметоксифеніл)-3H-1,2,4-тріазол-3-тіонів як потенційних антиоксидантів. Найвищу активність продемонстрували сполуки з 2,4-диметоксифенільними замісниками, що може бути використано для подальшого створення нових антиоксидантних препаратів.

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ АМАНТАДИНУ НА БІОМАРКЕРИ КАРБОНІЛ-ОКСИДАТИВНОГО СТРЕСУ У ЩУРІВ З ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЮ ЧЕРЕПНО-МОЗКОВОЮ ТРАВМОЮ

Лєвих А., Ткаченко В., Харченко Ю., Жилюк В.
Дніпропетровський державний медичний університет,
м. Дніпро, Україна
anton.lievych@dnu.edu.ua

Актуальність. Черепно-мозкова травма (ЧМТ) є однією з основних причин смерті та інвалідності людей різного віку. Після ЧМТ у головному мозку розвивається низка складних метаболічних змін, у тому числі карбонілювання білків, посилення перекисного окислення ліпідів, порушення вивільнення нейромедіаторів, дисбаланс енергозабезпечення, які пов'язані з розвитком різних функціональних розладів. Зважаючи на те, що досі не існує адекватного лікування, яке б пом'якшило руйнівний вплив карбоніл-

<i>Волощук Н., Золотарьова В., Гара А., Пашинська О.</i> ВПЛИВ БІОІДЕНТИЧНИХ ПЕЛЛЕТ З МЕТФОРМІНОМ НА ВМІСТ ГАЛЕКТИНУ-3 В МІОКАРДІ ЩУРІВ ЗА УМОВ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ЦУКРОВОГО ДІАБЕТУ	128
<i>Волощук Н., Крамар Г., Альчук О.</i> ВПЛИВ ПОХІДНОГО 4-[4-ОКСО-(4Н)-ХІНАЗОЛІН – 3-ІЛ] БЕНЗОЙНОЇ КИСЛОТИ НА РІВЕНЬ ІЛ-1 β У ЩУРІВ З АД'ЮВАНТНИМ АРТРИТОМ	129
<i>Гаврилюк Д., Карпюк І., Конечний Ю., Конечна Р.</i> РОЗРОБКА СКЛАДУ ГЕЛЮ НА ОСНОВІ ЕКСТРАКТУ <i>CALTHA PALUSTRIS</i> L.	130
<i>Герасимець І., Фіра Л.</i> ВИВЧЕННЯ ПРОТИЗАПАЛЬНОЇ АКТИВНОСТІ СУХОГО ЕКСТРАКТУ З ГРИБІВ РЕЙШИ НА МОДЕЛІ КАРАГЕНІНОВОГО НАБРЯКУ ЛАПИ ЩУРА	131
<i>Гладких Ф.</i> ВПЛИВ БЕЗКЛІТИННИХ БІОТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРЕПАРАТІВ НА КЛІТИННИЙ ЦИКЛ ГЕПАТОЦИТІВ НА МОДЕЛІ АУТОІМУННОГО ГЕПАТИТУ	132
<i>Гнатів І., Конечна Р.</i> ВИВЧЕННЯ АНТИБАКТЕРІАЛЬНОЇ ДІЇ ОЛІЇ ЯЛИЦІ	133
<i>Данилюк Д., Фіра Л.</i> ВИВЧЕННЯ ГОСТРОЇ ТОКСИЧНОСТІ НАСТОЙКИ З ЛИЧИНОК ВОСКОВОЇ МОЛІ ТА ПРОДУКТІВ ЇХ ЖИТТЄДІЯЛЬНОСТІ	135
<i>Довбня Д., Каплаушенко А.</i> ДОСЛІДЖЕННЯ АНТИОКСИДАНТНОЇ АКТИВНОСТІ ПОХІДНИХ 5-(2,4-, 3,4-ДИМЕТОКСИФЕНІЛ)-3Н-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОНІВ ЗА ДОПОМОГОЮ ДОКІНГОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ	136
<i>Левих А., Ткаченко В., Харченко Ю., Жилюк В.</i> ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ АМАНТАДИНУ НА БІОМАРКЕРИ КАРБОНІЛ-ОКСИДАТИВНОГО СТРЕСУ У ЩУРІВ З ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЮ ЧЕРЕПНО-МОЗКОВОЮ ТРАВМОЮ	136
<i>Михалець А., Бегдай А., Лижнюк В., Лісовий В., Бессарабов В., Матвеева Н.</i> ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОТИЗАПАЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕКСТРАКТУ <i>VIDENS PILOSA</i>	137
<i>Пастушенко Л., Герасимюк Н., Приступа Б.</i> ФАРМАКОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ЗІРОЧНИКА СЕРЕДНЬОГО	138
<i>Рожковський Я., Еберле Л., Садигова М.</i> ПРОТИЗАПАЛЬНА АКТИВНІСТЬ ЕКСТРАКТУ З НАСІННЯ <i>ASTRAGALUS GLYCYRHYLLOS</i> L.	139
<i>Рожковський Я., Еберле Л., Тодорова Д.</i> СКРИНІНГОВІ ДОСЛІДЖЕННЯ АНАЛГЕТИЧНОЇ АКТИВНОСТІ МАЗІ НА ОСНОВІ ЕКСТРАКТУ <i>ARMORACIA RUSTICANA</i> L.	140
<i>Стрілець О., Стрельников Л.</i> ВИЗНАЧЕННЯ ПРОТИМІКРОБНОЇ АКТИВНОСТІ ГУСТОГО ЕКСТРАКТУ МАРЕНИ КРАСИЛЬНОЇ (<i>RUBIA TINCTORUM</i> L.)	141
<i>Filipets N., Gerush O., Filipets O.</i> THE USE OF WATER-SALT LOADS FOR STUDIES ON THE NEPROTROPIC EFFECT OF MEDICINES	142