



**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**НАУКОВЕ ТОВАРИСТВО СТУДЕНТІВ, АСПІРАНТІВ, ДОКТОРАНТІВ І
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ**

**ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ
ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ СТУДЕНТІВ ТА МОЛОДИХ ВЧЕНИХ
«ДОСЯГНЕННЯ СУЧАСНОЇ МЕДИЧНОЇ ТА
ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ НАУКИ – 2022»**

4 лютого 2022 року



ЗАПОРІЖЖЯ – 2022

ОРГКОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ:

ГОЛОВА ОРГКОМІТЕТУ:

ректор ЗДМУ, Заслужений діяч науки і техніки України, проф. Колесник Ю.М.

ЗАСТУПНИКИ ГОЛОВИ:

проректор з наукової роботи, Заслужений діяч науки і техніки України, проф. Туманський В.О.;

голова Координаційної ради з наукової роботи студентів, проф. Бєленічев І.Ф.;

голова наукового товариства студентів, аспірантів, докторантів і молодих вчених, проф. Павлов С.В.;

секретар Координаційної ради з наукової роботи студентів, ст. викл. Абросімов Ю.Ю.;

голова студентської ради ЗДМУ Федоров А.І.

ЧЛЕНИ ОРГКОМІТЕТУ:

заступник голови студентської ради Будагов Р.І.; голова навчально-наукового сектору студентської ради Єложенко І.Л.

organic bases (monoethanolammonium, diethylammonium, diethanolammonium, morpholine, piperidine) synthesized by heating the starting materials in ethanol and subsequent evaporation of the solvent. Physicochemical properties of synthesized compounds have been studied in accordance with the requirements of the State Pharmacopoeia of Ukraine.

Results. Salts of 2-(5-phenyl-4-(4-methylphenyl)-1,2,4-triazole-3-ylthio)ethanoic acid were synthesized and their structure was proved.

Conclusions. The results of the conducted studies *in silico* confirm the prospects of the chosen direction of work.

ЗАСТОСУВАННЯ COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN ДЛЯ ПОШУКУ СПОЛУК З ГІПОГЛІКЕМІЧНОЮ ДІЄЮ СЕРЕД 3-БЕНЗИЛ-8-ГІДРАЗИНОМЕТИЛКСАНТИНІВ

Мелета С.О.

Науковий керівник: доц. Шкода О.С.

Кафедра біологічної хімії

Запорізький державний медичний університет

За даними ВООЗ поширеність цукрового діабету з 1980 р. збільшилась майже у 4 рази і на сьогодні це дев'ята причина летальності в світі. В умовах, коли контроль рівня глікемії стає неможливий за участі еталонних препаратів метформіну та глібенкламиду, ВООЗ та МФД рекомендують застосовувати інгібітори DPP-4 та SGLT-2.

У зв'язку з вищенаведеним нами була поставлена **мета** пошуку потенційних лігандів DPP-4, HSD11B1 та PPAR- γ методами CAMD серед похідних 3-бензил-8-гідразинометилксантину.

Для досягнення зазначеної мети нами було використане програмне забезпечення, як-от: ACD/ChemSketch Free Trial (підготовка файлів хімічних структур для розрахунку молекулярних дескрипторів), UCSF Chimera, ліцензовано для вільного некомерційного застосування (оптимізація просторової геометрії молекул, підготування pdb-файлів, візуалізація та аналіз результатів молекулярного докінгу), SwissADME (хмарний розрахунок молекулярних дескрипторів досліджуємих сполук), SwissDock (хмарний молекулярний докінг за методом EADock DSS на серверних потужностях Швейцарського інституту біоінформатики) та MS Excel (для проведення статистичного аналізу отриманих результатів).

Застосування перелічених вище програмних комплексів показало, що похідні 3-бензил-8-гідразинометилксантину мають високий нековалентний афінітет по відношенню до обраних білкових мішеней. Дані молекулярного докінгу добре корелюють із результатами експериментальних фармакологічних досліджень гіпоглікемічної активності методами *in vivo* та дещо можуть пояснити гіпотетичний молекулярний механізм глюкозознижувальної активності. Це також дозволило встановити залежності «будова-дія».

Таким чином, проведені дослідження є беззаперечно перспективним алгоритмом пошуку потенційних сполук з гіпоглікемічною дією серед 3-бензил-8-гідразинометилксантинів.