

5-(5-метилпіразол-3-іл)-4-феніл-1,2,4-тріазол-3-тіолу. Після чого вихідну речовину піддавали реакціям алкілування.

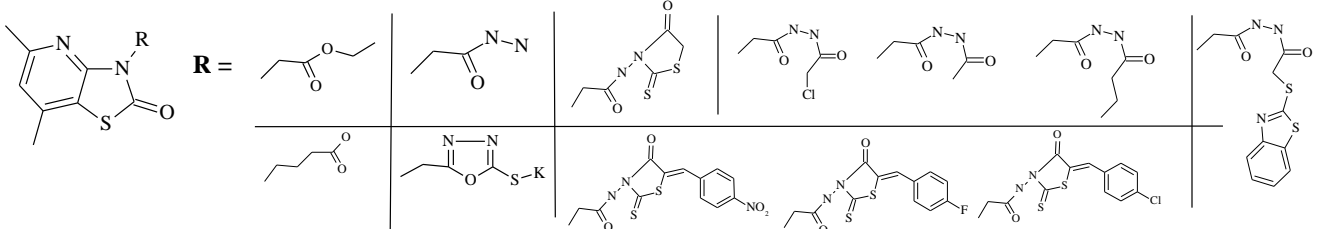
Структура всіх речовин була встановлена за допомогою фізико-хімічних методів аналізу (ІЧ-спектрофотометрія та ЯМР-спектрометрія). Усі отримані сполуки, за дослідженням гострої токсичності, виявились малотоксичними та майже нетоксичними. До однієї речовини виявився чутливим штам *P. aeruginosa*.

Висновки. Вивчено механізми реакцій та методи отримання різноманітних речовин, похідних 1,2,4-тріазолу та піразолу. Проведено бібліографічний огляд для вивчення потенційно можливих видів активності сполук, що синтезовано. Отримано ряд речовин, одна з яких виявилась біологічно активною і потребує подальшого вивчення.

ЛІГАНД-ОРІЄНТОВАНИЙ ПІДХІД У ВІРТУАЛЬНОМУ СКРИНІНГУ ПОХІДНИХ 3*H*-ТІАЗОЛО[4,5-*b*]ПІРИДИН-2-ОНУ ЯК ПОТЕНЦІЙНИХ АНТИЕКСУДАТИВНИХ ЗАСОБІВ

І. Б. Вишньовська, О. В. Кленіна, В. В. Огурцов, Т. І. Чабан, І. В. Драпак
Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького,
olena.klenina@yahoo.com

Визначення кількісних закономірностей зв'язку «структура – біологічна активність» (QSAR-аналіз) є ліганд-орієнтованою методологією віртуального скринінгу, призначеною для встановлення кореляції між активністю та молекулярними властивостями речовин, розрахованими з використанням двовимірного (2*D*) або тривимірного (3*D*) представлення структур лігандів.



Було здійснено QSAR-аналіз 12 похідних 3*H*-тіазоло[4,5-*b*]піридин-2-ону: Вивчення впливу синтезованих речовин на протікання ексудативної фази запалення проводилось на основі карагенінової моделі запального набряку лап білих щурів. Оптимізацію структур досліджуваних речовин здійснювали методами молекулярної механіки MM+ та напівемпіричним AM1, використовуючи програмний пакет HyperChem 7.5. Величини молекулярних 3*D* дескрипторів сполук були згенеровані програмою E-DRAGON. Використано метод множинної лінійної регресії для одержання QSAR-моделей з використанням програми BuiltQSAR. Одержані ряд моделей, що містять 3*D* молекулярні дескриптори з груп RDF, GETAWAY та 3*D*-MoRSE і характеризуються високими значеннями коефіцієнтів кореляції ($R=0,827\div 0,918$), достатньою адекватністю ($F=26,6\div 50,1$) та прогнозуючою здатністю ($Q^2_{\text{LOO}} = 0,607\div 0,795$). Одержані QSAR-моделі можуть бути використані для віртуального скринінгу та подальшого цілеспрямованого синтезу кандидатів у лікарські засоби серед даного класу сполук, які проявлятимуть високу антиексудативну активність.