

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКА МІСЬКА РАДА
ДЕПАРТАМЕНТ ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я ХАРКІВСЬКОЇ МІСЬКОЇ РАДИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Серія «Наука»

«ЛІКИ – ЛЮДИНІ»

Матеріали VII Міжнародної
науково-практичної конференції

21-22 березня 2024 року
м. Харків

*Реєстраційне посвідчення УкрІНТЕІ
№ 593 від 11 грудня 2024 року*

Харків
НФаУ
2024

Редакційна колегія:

Головний редактор – проф. І. М. Владимірова

Заступник головного редактора – проф. І. В. Кіреєв

Члени редакційної колегії: доц. Н. В. Жаботинська, доц. О. О. Рябова, К. В. Цеменко, Л. М. Мовчан, І. В. Боцула

«Ліки – людині»: матеріали VII Міжнар. наук.-практ. конф. (21-22 березня 2024 року) – Х. : НФаУ, 2024. – 324 с.

Збірник містить тези доповідей VII Міжнародної науково-практичної конференції «Ліки – людині», де розглядаються проблеми фармакоterapiї захворювань людини, наводяться результати експериментальних та клінічних досліджень, аспекти вивчення й упровадження нових лікарських засобів, доклінічні фармакологічні дослідження біологічно активних речовин природного і синтетичного походження. Наведено також праці, присвячені особливостям викладання медико-біологічних і клінічних дисциплін у закладах вищої освіти.

Видання розраховано на широке коло наукових і практичних працівників медицини і фармації.

Відповідальність за зміст наведених матеріалів несуть автори.

Editorial board:

The editor-in-chief - prof. I. M. Vladimirova

Deputy Editor-in-Chief - prof. I. V. Kireyev

Members of the editorial board: ass. prof. N. V. Zhabotynska, ass. prof. O. O. Ryabova, K. V. Tsemenko, L. M. Movchan, I. V. Botsula

«Medicines for humans. Modern issues of pharmacotherapy and drugs prescription»: materials VII International. scientific-practical conf. (March 21-22, 2024) - Kh. : NUPh, 2024. - 324 p.

The collection contains abstracts of the VII International Scientific and Practical Conference «Medicines for humans. Modern issues of pharmacotherapy and drugs prescription», which deals with the problems of pharmacotherapy of human diseases, presents the results of experimental and clinical studies, aspects of study and implementation of new drugs, preclinical pharmacological studies of biologically active substances of natural and synthetic origin. There are also works devoted to the peculiarities of teaching medical-biological and clinical disciplines in higher education institutions.

The publication is designed for a wide range of scientific and practical workers in medicine and pharmacy.

The authors are responsible for the content of these materials.

БІОЛОГІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ РЯДУ ПОХІДНИХ 4-ФЕНІЛ-5-(ПІРИДИН-2-ІЛ)-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОЛУ

Полуботко В.В., Куліш С.М., Гоцуля А.С.

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет,
м. Запоріжжя, Україна

Інтенсивне використання похідних 1,2,4-триазолу в синтезі біологічно активних сполук свідчить про їх високий потенціал у фармацевтичній науці. Дослідження в цьому напрямку не лише збагачує наше розуміння процесів взаємодії молекул на молекулярному рівні, але й відкриває нові можливості для створення ефективних препаратів для лікування різноманітних захворювань.

Метою роботи був синтез піридиновмісних тіоалкілпохідних 1,2,4-триазол-3-тіолу та оцінка біологічного потенціалу одержаних сполук.

Вихідна речовина, піридин-2-карбонова кислота, була піддана етерифікації етанолом у присутності сульфатної кислоти, що дозволило одержати етиловий ефір піколінової кислоти. Гідразиноліз одержаного естеру дозволив синтезувати відповідний гідразид. Останній в реакції з фенілізотіоціанатом в спиртовому середовищі дозволив одержати 2-(піридин-2-іл)-*N*-феніл-1-гідразинокарбтіоамід, який в подальшому у лужному середовищі був перетворений у 4-феніл-5-(піридин-2-іл)-1,2,4-триазол-3-тіол. Алкілування 4-феніл-5-(піридин-2-іл)-1,2,4-триазол-3-тіону бромалканами ($C_nH_{2n+1}Br$; $n = 1-10$) проводились в середовищі етанолу в присутності еквімолекулярної кількості натрій гідроксиду. Продукти хімічного перетворення очищені перекристалізацією із суміші етанол : вода (1:1).

Підтвердження структури та індивідуальності синтезованих сполук проводили за допомогою елементного аналізу, ІЧ-спектрофотометрії, 1H ЯМР-спектроскопії, хромато-мас-спектрометрії. Прогнозування *in silico* показників гострої токсичності та мутагенності здійснено за допомогою програмного забезпечення Т.Е.С.Т. Подальші дослідження з використанням молекулярного докінгу до активних сайтів модельних ферментів (циклооксигенази-1 та 2, ланостерол 14 α -деметилази, кінази анапластичної лімфоми) посприяли у визначенні подальших шляхів у дослідженні біологічних властивостей синтезованих сполук. Предиктивне визначення фармакокінетичних показників та дескрипторів були проведено за допомогою Swiss-ADME он-лайн платформи, що дозволило сформулювати уявлення щодо відповідності досліджуваних сполук параметрам лікоподібності.

У процесі виконання роботи було синтезовано 15 *S*-похідних 4-феніл-5-(піридин-2-іл)-1,2,4-триазол-3-тіону, які предиктивно позиціонуються як вірогідно малотоксичні речовини з високим потенціалом протигрибкової активності.