

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.

# ЗАГАЛЬНА *IN SILICO* ОЦІНКА ФАРМАКОЛОГІЧНОГО ПОТЕНЦІАЛУ 3,5-ДИМЕТИЛ-4-(3-(5-НІТРОФУРАН-2-ІЛ)АЛІЛІДЕНАМІНО)-1-АЛКІЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛІЯ ГАЛОГЕНІДІВ

Британова Т. С.

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

Похідні 3,5-диметил-4-аміно-1,2,4-триазолу належать до перспективного класу органічних сполук, хімічна трансформація яких створює значні можливості для одержання біологічно активних сполук.

Метою роботи була *in silico* оцінка фармакологічного потенціалу 3,5-диметил-4-(3-(5-нітрофуран-2-іл)-аліліденаміно)-1-алкіл-1,2,4-триазолія галогенідів, структура яких була сформована в результаті взаємодії 3,5-диметил-4-аміно-1-алкіл-1,2,4-триазолій бромідів з 5-нітро-2-фурилакролеїном.

На першому етапі хімічної частини роботи до структури вихідного 3,5-диметил-4-аміно-1,2,4-триазолу було введено алкільний замісник ( $C_nH_{2n+1}Br$ ;  $n=3-10$ ). В подальшому в утвореному продукті була функціоналізована аміногрупа за участі 5-нітро-2-фурилакролеїну. Структура синтезованих сполук була доведена елементним аналізом,  $^1H$  ЯМР спектроскопією, ІЧ-спектрофотометрією, а їх індивідуальність – хромато-мас-спектрометрією.

Рівень фармакологічних перспектив одержаного ряду сполук був визначений з залученням доступних *in silico* методів. Предиктивна оцінка показників гострої токсичності та мутагенності була одержана з використанням он-лайн платформи T.E.S.T. За більшістю фізико-хімічних показників, які визначаються як важливі з загальних позицій ADME-аналізу, більшість сполук відповідає необхідним вимогам. Так само визначається у більшості випадків успішне подолання визначених ADME-аналізом фільтрів лікоподібності.

Наступні дослідження одержаних сполук були доповнені молекулярним докінгом (AutoDock, Open Babel, MGL Tools, BIOVIA, AUTOGRIID) до активних сайтів циклооксигенази-1 та 2, ланостерол  $14\alpha$ -деметилази, анапластичної лімфоми кінази. За результатами цього етапу досліджень вдалось визначити природу амінокислотних залишків, які можуть активно примати участь у формуванні зв'язків з активними центрами обраних ензимів. Результати візуалізації докінгових взаємодій були доповнені значеннями мінімальної енергії взаємодії з активним сайтом відповідних ферментів.

На основі проведеного *in silico* дослідження встановлений загальний предиктивний фармакологічний потенціал синтезованих 3,5-диметил-4-(3-(5-нітрофуран-2-іл)аліліденаміно)-1-алкіл-1,2,4-триазолій бромідів.