



Міністерство охорони здоров'я України  
Міністерство освіти і науки України  
Національний фармацевтичний університет  
Кафедра фармацевтичної хімії  
Кафедра загальної хімії

Міжнародна internet-конференція

# Modern chemistry of medicines

25 вересня 2024 р.  
м. Харків, Україна

Посвідчення Державної наукової  
установи «Український інститут  
науково-технічної експертизи та  
інформації» № 263 від 16.04.2024 р.

Міністерство охорони здоров'я України  
Міністерство освіти і науки України  
Національний фармацевтичний університет  
Кафедра фармацевтичної хімії  
Кафедра загальної хімії

Ministry of health of Ukraine  
Ministry of education and science of Ukraine  
National university of pharmacy  
Pharmaceutical chemistry department  
General chemistry department

# **MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES**

## **Матеріали**

**Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,  
до 85-річчя з дня народження професора Петра Овксентійовича Безуглого  
25 вересня 2024 року**

## **Materials**

**of the International Internet Conference 'Modern chemistry of medicines',  
dedicated to the 85th Anniversary of Professor Petro O. Bezuglyi  
September 25, 2024**

**ХАРКІВ  
KHARKIV  
2024**



## Біологічний потенціалу 1-алкілпохідних 3,5-диметил-4-((4-нітробензиліден)аміно)-1,2,4-триазолій броміду

Тетяна Британова, Андрій Гоцуля

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет м. Запоріжжя, Україна  
[goculyats@gmail.com](mailto:goculyats@gmail.com)

**Вступ.** Створення сучасних оригінальних вітчизняних біологічно активних субстанцій з залученням гетероциклічних сполук лишається перспективним напрямком сучасної науки. Структура 1,2,4-триазолу та його похідних є зручним об'єктом для різноманітних форм хімічних трансформацій, що дозволяє спрямовано та високовірогідно формувати певний тип біологічної активності. Поєднання даного гетероциклу з відомим фармакофорами та високореакційними функціональними групами лише посилює окреслені перспективи наукової роботи.

**Метою роботи** була попередня оцінка перспектив створення біологічно активної субстанції на основі 1-алкілпохідних 3,5-диметил-4-((4-нітробензиліден)аміно)-1,2,4-триазолій броміду за допомогою методів *in silico* досліджень.

**Матеріали та методи.** Токсикологічні характеристики представленого ряду сполук визначались за допомогою програмного продукту T.E.S.T. (Toxicity Estimation Software Tool), який використовує математичні моделі, що дозволяє передбачити потенційні ризики без проведення експериментів з залученням лабораторних тварин. Попередня оцінка фізико-хімічних властивостей, фармакокінетичних параметрів, а також загальної лікоподібності була надана з використання он-лайн сервісу SwissADME, який дозволяє оптимізувати фармакологічні дослідження. Доповнити уявлення щодо практичних перспектив дослідженого ряду сполук допоміг молекулярний докінг до активних центрів циклооксигенази-2, ланостерол 14 $\alpha$ -деметилази, пептидної деформілази, кінази анапластичної лімфоми та цитрохром с-пероксидази. Для підготовки та здійснення докінг-аналізу використали програмні комплекси MarvinSketch, HyperChem, Open Babel, Discovery Studio, AutoDock Tools/Vina. Інформацію щодо структури модельних ферментів взято з бази даних Protein Data Bank.

**Результати та обговорення.** Одержаний розрахований інтервал значень середньосмертельної дози дозволяє охарактеризувати представлений ряд сполук як малотоксичні. Натомість показники мутагенності говорять про досить високу вірогідність проявлення небезпечних властивостей, пов'язаних з цим явищем. Додатково можна зазначити прогнозований середній рівень екотоксичності даних сполук. Розрахунок проводився за допомогою графічного інтерфейсу вебсайту SwissADME. При аналізі результатів були враховані наступні дескриптори та параметри: ліпофільність, площа полярних поверхонь молекул, фракція  $C_{sp^3}$ , кількість обертових зв'язків, молярна рефракція. Згідно цих показників переважна більшість синтезованих сполук відповідають необхідним критеріям. Також для дослідженого ряду сполук було спрогнозовано адсорбцію, біодоступність та проникність крізь біобар'єри. Згідно до критеріїв лікоподібності, переважну більшість розглянутих речовин можна вважати лікоподібними. За результатами молекулярного докінгу встановлено, що значна частина взаємодій з активними центрами має гідрофобний характер і проявляє тенденції до збільшення по мірі подовження алкільного замісника при першому атомі Нітрогену 1,2,4-триазолового синтону. Також встановлено, що найбільшого впливу зазнають ланостерол 14 $\alpha$ -деметилаза та пептидна деформілаза.

**Висновки.** 1-Алкілпохідні 3,5-диметил-4-((4-нітробензиліден)аміно)-1,2,4-триазолій броміду є перспективним джерелом одержання біологічно активної субстанції з протигрибковою та антимікробною активностями.



<b>Фармакологічний потенціал 4-метоксифенілпохідних 1,2,4-триазол-3-тіолу.....</b>	<b>56</b>
Наталія Аль Халаф, Андрій Гоцуля	
<b>Протимікробна активність гелю на основі композицій сукцильованого нізину і сукцильованого диклофенаку натрію щодо клінічних штамів мікроорганізмів .....</b>	<b>57</b>
Ірина Андрєєва, Тетяна Осолодченко, Олена Батрак, Ірина Рябова	
<b>Виявлення та ідентифікація антидепресантів групи селективних інгібіторів зворотнього захвату серотоніну в умовах загального ТШХ-скринінгу .....</b>	<b>58</b>
Сергій Баюрка, Світлана Карпушина	
<b>Текстильний матеріал з антибактеріальними властивостями .....</b>	<b>59</b>
Анастасія Бегдай, Ольга Сив'юк, Олена Іщенко, Галина Кузьміна, Вікторія Лижнюк, Вадим Лісовий, Володимир Бессарабов	
<b>Аналіз вимог до забезпечення якості та безпеки медичних виробів на території України .....</b>	<b>60</b>
Ірина Бедьо, Олена Бєвз, Олександр Криванич	
<b>Дослідження розчинів полуксамерів і впливу на їх властивості етанолу й пропіленгліколю.....</b>	<b>61</b>
Олена Безугла, Олексій Ляпунов, Олексій Лисокобилка, Юрій Столпер, Микола Ляпунов	
<b>Судово-токсикологічна експертиза отруєнь важкими металами.....</b>	<b>62</b>
Галина Бигар	
<b>Синтез та протимікробна активність фенілових естерів кумарин-3-карбонових кислот .....</b>	<b>63</b>
Ігор Білов, Ірина Журавель, Оксана Бризицька, Сергій Колісник, Сергій Баюрка	
<b>Аналіз хімічного складу пармелії борозенчастої сланей (<i>Parmelia Sulcata</i>) з огляду перспектив розробки фітосубстанцій для лікування опікових ушкоджень шкіри .....</b>	<b>64</b>
Благовісна К.В., Зуйкіна С.С.	
<b>Розрахунок очікуваного терміну використання медичного виробу на прикладі імплантатів ін'єкційних за вимогами оновлених регуляторних вимог Європейського Союзу .....</b>	<b>65</b>
Інна Бондарець, Вікторія Георгіянц	
<b>Біологічний потенціалу 1-алкілпохідних 3,5-диметил-4-((4-нітробензиліден)аміно)-1,2,4-триазолій броміду.....</b>	<b>66</b>
Тетяна Британова, Андрій Гоцуля	