



**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИКО-ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ**

**КООРДИНАЦІЙНА РАДА З НАУКОВОЇ РОБОТИ СТУДЕНТІВ, АСПРАНТІВ,
ДОКТОРАНТІВ І МОЛОДИХ ВЧЕНИХ
СТУДЕНТСЬКА РАДА**

ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ

**84 ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ МОЛОДИХ ВЧЕНИХ ТА СТУДЕНТІВ З
МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ**

**«АКТУАЛЬНІ ПИТАННЯ
СУЧАСНОЇ МЕДИЦИНИ ТА ФАРМАЦІЇ - 2024»**

23-24 травня 2024 року



ЗАПОРІЖЖЯ – 2024

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

Полуботко В. В.

Науковий керівник: к. фарм. н, доц. Куліш С. М.

Кафедра токсикологічної та неорганічної хімії

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет

Актуальність. Використання 1,2,4-триазолу для розробки біоактивних сполук широко поширене в фармацевтичній науці. Ця напрямлена робота дозволяє систематично розширювати наше розуміння того, як ліки взаємодіють з рецепторами на молекулярному рівні. Це в свою чергу сприяє постійному вдосконаленню процесу створення нових ліків.

Метою роботи був синтез похідних 1,2,4-триазол-3-тіолу з піридиновим замісником та тіоалкановим фрагментом з визначенням фармакологічних перспектив даних сполук.

Матеріал та методи. Вихідна піридин-2-карбонова кислота була залучена до процесу етерифікації за участю етанолу за умов сульфатнокислого каталізу. Застосування гідразінолізу до одержаного естеру призвело до синтезу відповідного гідразиду, який в реакції з фенілізотіоціанатом був перетворений у 2-(піридин-2-іл)-*N*-феніл-1-гідразінокарботіоамід. Лужна циклізація дозволила сформувати 4-феніл-5-(піридин-2-іл)-1,2,4-триазол-3-тіол. Алкілування виділеного тіолу бромалканами проводилось в етанолі. Структуру та унікальність сполук підтверджували елементним аналізом, ІЧ-спектрофотометрією, ¹H ЯМР-спектроскопією та хромато-мас-спектрометрією. Процес прогнозування *in silico* показників гострої токсичності та мутагенності здійснено за допомогою програми T.E.S.T. Додаткові дослідження (AutoDockTools-1.5.6) були реалізовані молекулярним докінгом до активних сайтів циклооксигенази-1 та 2, ланостерол 14 α -деметилази, кінази анапластичної лімфоми (PDB). Фармакокінетичні показники та дескриптори з наступною лікоподібністю передбачені з використанням онлайн-платформи Swiss-ADME.

Результати. Виділений ряд *S*-алкілпохідних 4-феніл-5-(піридин-2-іл)-1,2,4-триазол-3-тіолу характеризується як потенційно малотоксичні речовини з невисокою вірогідністю проявлення мутагенності. Досліджені сполуки продемонстрували здатність утворювати значну кількість зв'язків з активним центром ланостерол 14 α -деметилази у поєднанні з показниками мінімальної енергії формування комплексу на рівні референс-препаратів. Сполуки характеризуються також загальним сприятливим профілем лікоподібності.

Висновки. Встановлені оптимальні умови синтезу *S*-алкілпохідних 4-феніл-5-(піридин-2-іл)-1,2,4-триазол-3-тіолу, які попередньо позиціонуються як вірогідно малотоксичні речовини з високим потенціалом протигрибкової активності.

СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ АМІДІВ 2-(5-МЕТИЛ-4-(*para*-МЕТОКСИФЕНІЛ)-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІЛТІО)ЕТАНОВОЇ КИСЛОТИ

Славська О. О.

Науковий керівник: к. фарм. н, ст. викл. Аль Халаф Н. А.

Кафедра токсикологічної та неорганічної хімії

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет

Актуальність. Збагачення структури похідних 1,2,4-триазолу фармакофорним фрагментом *para*-метоксифенільного замісника та реакційно здатною меркапто-групою дозволяє одержувати потенційні біологічно активні сполуки.

Метою роботи був синтез похідних 1,2,4-триазол-3-тіолу з *para*-толілним замісником та амідною групою з визначенням фармакологічних перспектив даних сполук.

Матеріал та методи. Шляхом гідразінолізу вихідний етилацетат було перетворено на відповідний гідразид, що в подальшому в реакції з *para*-метоксифенілізотіоціанатом дозволило одержати 2-ацетил-*N*-(4-метоксифеніл)гідразінокарботіоамід. Подальша циклізація у лужному середовищі дозволила сформувати 4-(4-метоксифеніл)-5-метил-1,2,4-триазол-3-тіол. Конструювання 2-(5-метил-4-(4-метоксифеніл)-1,2,4-триазол-3-ілтіо)-