

Kucheryavyi Yu. M.  
post-graduate of physical  
and colloid chemistry department, ZSMU

Lihnenko A. V.  
5<sup>th</sup> year student  
of 1<sup>st</sup> pharmaceutical faculty, ZSMU

Lihnenko Yu. V.  
5<sup>th</sup> year student  
of 1<sup>st</sup> pharmaceutical faculty, ZSMU

Supervisor: Kaplaushenko A. G., doctor of pharmacy, assistant professor,  
head of the physical and colloid chemistry department; ZSMU  
Samko A. V. senior lecturer, department of management and pharmacy economics, medical and  
pharmaceutical commodity research, ZSMU

### **THE RESEARCH OF THE ADSORPTION PROPERTIES OF 5-(PHENOXYMETHYLENE)-4-R-3-ALKYLTHIO-1,2,4-TRIAZOLES WITH HIGH-PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHY-MASS-SPECTROMETRY**

An important aspect of searching new biologically active molecules is prediction of pharmacokinetic parameters for these compounds. Before inserting a needful pharmacophore group into the structure, to achieve a certain type of biological activity, it's necessary to define and calculate the possible adsorption properties of the molecule. The speed and efficiency of the molecule transport ability will depend on its bioavailability, therapeutic dose, side effects, etc. The lyophilicity is one of the important factors which determines the adsorption capacity of not water-soluble substances. And lyophilicity is also an affinity measure of organic substances to lipids.

According to the analyzed literary sources [Ліпофільність S-похідних нітрогеновмісних гетероциклів / [М. П. Завгородній, О. А. Бражко, Л. О. Омелянчик та ін.]. // Вісник Запорізького національного університету. – 2012. – №2. – С. 150–155.], it has been found a close relationship between the growth rate of adsorption properties of the compounds and its biological effects. It probably can be explained by better accumulation of compounds in adipose tissues and increasing the speed of penetration through the skin or biological membranes, which structurally are also lipids. Predecessors have already been established the dependence of adsorption on the length of hydrophobic molecules fragment and findings of biological effects and acute toxicity for some 5-R-4-R<sub>1</sub>-3-alkylthio-1,2,4-triazoles [Самелюк Ю. Г. Синтез та дослідження біологічно активних похідних 1,2,4-тріазол-3-тіону, що містять метоксифенільні замісники : дис. канд. фарм. наук : 15.00.02 / Самелюк Юрій Геннадійович – Запоріжжя, 2016. – 235 с.]. The research principle has been based on the determination of surface tension of synthesized compounds solutions, calculation of the adsorption using Gibbs equation and next correlation of the results with biological research data. But it would be better first to prove this dependence from a theoretical point view.

To reach the purpose we decided to calculate the partition coefficient for previously synthesized 5-(phoxymethylene)-4-R-3-alkylthio-1,2,4-triazoles (R = C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>; alk = CH<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>, C<sub>7</sub>H<sub>15</sub>, C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>, C<sub>9</sub>H<sub>19</sub>, C<sub>10</sub>H<sub>21</sub>) and correlate these results with obtained data of

retention time on a chromatographic column using high-performance liquid chromatography-mass-spectrometry (HPLC-MS). The LogP (partition coefficient), which is a measure of lipophilicity has been calculated using the software package ACDlabs 6.0. To get the linear dependence between LogP and retention time of our compounds on the chromatographic column we also have calculated logarithm of coefficient of capacitance ( $lgk$ ) using formula  $lgk = lg((t_R - t^0)/t^0)$ , where  $t_R$  is retention time of compound,  $t^0$  is retention time of  $KNO_3$  (0.6 min). Comparing obtained results, we have set direct relationship between LogP and  $lgk$ . This once again proves predecessors study on adsorption properties of organic hydrophobic substances. Also, allows using HPLC-MS to set experimentally the retention time and calculate partition coefficient for compounds of one homologous range. This experimental principle allows researchers will use more simple methods to calculate the adsorption data and predict hydrophilic and lipophilic properties of some substituents planning the structures of new biologically active substances.

*Лимарь Євгенія  
студентка 4-го курсу біологічного факультету  
Запорізького національного університету  
Науковий керівник: к. х. н., доц. Луганська О. В.*

## **ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ РОБОТИ ІОНОСЕЛЕКТИВНИХ ЕЛЕКТРОДІВ**

Мембрана, як основний компонент будь-якого іоноселективного електрода (ІСЕ) володіє іонообмінними властивостями, при чому проникність її до іонів різного типу відрізняється.

Мембрани ІСЕ можуть бути твердими і рідкими. Незалежно від типу мембрани, поведінка таких електродів підкорюється деяким загальним закономірностям [Лебідь, 2008]. Відмінність полягає лише в деталях механізму перенесення іона через межу розділу двох фаз і всередині мембрани. Якщо чутлива мембрана поміщена між двома розчинами електроліту з різною концентрацією, то через неї можливе переміщення іонів тільки певного типу в напрямку до розчину з меншою концентрацією рухомого іона. На поверхні мембрани встановлюється динамічна рівновага, при якому потенціал, що виникає відповідає величині, необхідній для запобігання подальшого руху іонів.

Якщо в процесі обміну бере участь лише один вид іонів, то електрорушійна сила (ЕРС) гальванічного елемента, що складається з ІСЕ і зовнішнього електрода порівняння, являється сумою локальних міжфазних стрибків потенціалу і змінного потенціалу – функції активності (концентрації) визначуваного іона в досліджуваному розчині, і залежить від природи мембрани.