



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

Міжнародна internet-конференція

Modern chemistry of medicines

18 травня 2023 р.
м. Харків, Україна

Повідчення Державної наукової
установи «Український інститут
науково-технічної експертизи та
інформації» № 550 від 19.12.2022 року

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

Ministry of health of Ukraine
Ministry of education and science of Ukraine
National university of pharmacy
Pharmaceutical chemistry department
Medicinal chemistry department
General chemistry department
Analytical chemistry and analytical toxicology department

MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES

Матеріали
Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,
18 травня 2023 року

Materials
of the International Internet Conference ‘Modern chemistry of medicines’,
May 18, 2023

ХАРКІВ
KHARKIV
2023

УДК 615.3(06)

М 78

Електронне видання мережне

Редакційна колегія: проф. Котвіцька А. А., проф. Владимірова І. М., проф. Георгіянц В.А., проф. Перехода Л.О., проф. Журавель І.О., проф. Колісник С.В., доц. Криськів О.С., проф. Власов С.В., ас. Смєлова Н.М., ас. Григорів Г.В.

Конференція зареєстрована в УкрІНТЕІ (посвідчення № 550 від 19.12.2022 р.)

М78 **Modern** chemistry of medicines: матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (18 травня 2023 р., м. Харків) – Електрон. дані. – Х. : НФаУ, 2023. – 284 с. – Назва з тит. екрана.

Збірник містить матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (18 травня 2023 р., м. Харків) присвячені висвітленню сучасних тенденцій створення оригінальних АФІ синтетичного та рослинного походження, фармацевтичної розробки, забезпечення якості лікарських засобів.

Для широкого кола наукових та практичних фахівців у галузі фармації та медицини, магістрантів, аспірантів, докторантів, співробітників фармацевтичних підприємств, викладачів закладів вищої освіти.

Редколегія не завжди поділяє погляди авторів.

Автори опублікованих матеріалів несуть повну відповідальність за підбір, точність наведених фактів, цитат, економіко-статистичних даних, власних імен та інших відомостей.

Матеріали подаються мовою оригіналу.

УДК 615.3(06)

© НФаУ, 2023

СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ ПОХІДНИХ 4-(4-ХЛОРОФЕНІЛ)-5-(ПІРОЛ-2-ІЛ)-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОЛУ

Плиска П. В., Гоцуля А. С.

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет,

Запоріжжя, Україна

andrey.goculya@gmail.com

Вступ. Похідні 1,2,4-триазолу високим хімічним та фармакологічним потенціалом, що робить даний клас сполук високоперспективним в сенсі створення оригінального лікарського засобу. Серед напрямків перших етапів роботи з даним циклом особливе місце посідає можливість його поєднання з гетероциклічними синтонами іншої природи. Зазначений підхід значно полегшує створення бажаного продукту хімічної трансформації, який у підсумку має шанс утворення біологічно активної субстанції.

Метою роботи був синтез похідних 4-(4-хлорофеніл)-5-(пірол-2-іл)-1,2,4-триазол-3-тіолу як потенційних біологічно активних сполук.

Матеріали та методи. Першочергово було синтезовано 2,2,2-трихлоро-(1-пірол-2-іл)етанон. Перебіг реакції відбувався за участю піролу та трихлороацетилхлориду. Далі було одержано пірол-2-карбогідразид шляхом залучення вихідної речовини у гідразиноліз. Одержаний продукт реакції був використаний у реакції взаємодії з 4-хлорофенілізотіоціанатом, який попередньо було синтезовано. Виділений *N*-(4-хлорофеніл)-2-(пірол-2-карбоніл)гідразин-1-карботіоамід на наступному етапі підлягав внутрішньомолекулярній гетероциклізації. Синтезований 4-(4-хлорофеніл)-5-(пірол-2-іл)-1,2,4-триазол-3-тіол був використаний у реакціях алкілування галогеналканами. Будова синтезованих сполук підтверджена елементним аналізом, ІЧ-спектрофотометрією та ¹H ЯМР-спектроскопією. Індивідуальність – хромато-мас-спектрометрією.

Наступна фаза досліджень була пов'язана з методами комп'ютерної хімії. Так, в дослідницьку роботу було залучено веб-ресурс SwissADME та молекулярний докінг. Для докінгових досліджень були залучені моделі циклооксигенази-2 та ланостерол-14α-деметилази, які були завантажені з Баз даних білків. Дослідження на даному етапі були проведені з використанням пакету програм: AutoDock 4.2.6, Open Babel 3.1.1, MGL Tools-1.5.6, BIOVIA.

Результати та їх обговорення. Результати прогнозу фізико-хімічних властивостей, ліпофільності, фармакокінетичних властивостей, біодоступності та синтетичної спроможності демонструють, що більшість досліджуваних сполук відповідає необхідним критеріям. Візуалізація результатів докінгу демонструє можливість утворення стійких комплексів представлених лігандів з активними центрами модельних ензимів. Більш переконливо виглядають комплекси з ланостерол-14α-деметилазою.

Висновки. Визначені оптимальні умови синтезу *S*-алкілпохідних 4-(4-хлорофеніл)-5-(пірол-2-іл)-1,2,4-триазол-3-тіолу, доведена перспективність подальших досліджень даного ряду сполук на протигрибкову активність.