

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 фармакотерапії 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.

СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ 5-МЕТИЛ-4-(4-МЕТИЛФЕНІЛ)-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОЛУ ТА ЙОГО АЛКІЛПОХІДНИХ

Кучеренко Х. С., Гоцуля А. С.

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

З кожним днем пошук і аналіз нових біологічно активних сполук стає все більш важливим. Основною метою таких досліджень є створення нових ефективних і безпечних речовин. Останнім часом велика увага науковців приділяється похідним 1,2,4-триазолу, лікарські засоби на основі яких успішно використовуються для боротьби з мікозами, тривожними станами, онкологічними та іншими захворюваннями. Тому створення нових біологічно активних речовин на основі даного гетероциклу є актуальним.

Метою роботи була оцінка перспективності створення фармакологічно перспективних сполук в ряду *пара*-толільних похідних 1,2,4-триазолу.

Реалізація поставленої задачі передбачала покрокове формування ряду *S*-алкілпохідних 5-метил-4-(4-метилфеніл)-1,2,4-триазол-3-тіолу з наступною *in silico* оцінкою їх фармакологічного профілю. Як вихідні сполуки були використані ацетогідразид та 4-метилфенілізотіоціанат, взаємодією яких було сформовано 2-ацетил-*N*-(4-метилфеніл)-гідразинокарботіоамід, що посприяло формуванню у лужному середовищі відповідного тіолу. Подальша модифікація одержаної сполуки передбачала застосування галогеналканів як алкілюючих агентів. Структура синтезованих *S*-алкілпохідних 5-метил-4-(4-метилфеніл)-1,2,4-триазол-3-тіолу була підтверджена елементним аналізом, ¹H ЯМР спектроскопією, індивідуальність – хромато-мас-спектрометрією.

За допомогою *in silico* методів та з залученням он-лайн платформи Т.Е.С.Т. надано оцінку токсичних ризиків в ряду синтезованих сполук. Он-лайн ресурс SwissADME допоміг встановити ряд важливих фізико-хімічних та фармакокінетичних параметрів, а також відповідність загальним критеріям лікоподібності. Докінгові дослідження були проведені з використанням модельних ензимів циклооксигеназа-1 та 2, а також ланостерол 14α-деметилаза. Для цього був залучений пакет програм: AutoDock 4.2.6, Open Babel 3.1.1, MGL Tools-1.5.6, BIOVIA та AUTOGRIID. Оцінка одержаних результатів відбувалась з використанням якісних та кількісних параметрів.

За результатами досліджень *S*-алкілпохідні 5-метил-4-(4-метилфеніл)-1,2,4-триазол-3-тіолу предиктивно визначені як малотоксичні речовини з невисоким ризиком проявлення мутагенних властивостей та значимою відповідністю критеріям лікоподібності. Теоретично обґрунтовано перспективність подальшого дослідження протигрибкових властивостей даних сполук.