



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

**КООРДИНАЦІЙНА РАДА З НАУКОВОЇ РОБОТИ СТУДЕНТІВ, АСПІРАНТІВ,
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

Висновки. Сформований ряд *S*-алкілпохідних 5-метил-4-(4-метилфеніл)-1,2,4-триазол-3-тіолу обґрунтовано може бути рекомендований для подальшого дослідження методами *in vitro* та *in silico* в проекції визначених біологічних властивостей.

СИНТЕЗ ТА ФАРМАКОЛОГІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ 2-(5-МЕТИЛ-4-(2-МЕТОКСИФЕНІЛ)-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІЛТІО)АЦЕТАМІДІВ

Олійник А. К.

Науковий керівник: д. фарм. н, доц. А. С. Гоцуля

Кафедра токсикологічної та неорганічної хімії

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет

Актуальність. Вагомі результати в науковому секторі медичної хімії, які були одержані за участю похідних 1,2,4-триазолу, підтверджують значний біологічний потенціал даних сполук.

Метою роботи був синтез 2-(5-метил-4-(2-метоксифеніл)-1,2,4-триазол-3-ілтїо)-ацетамідів та прогнозування біологічних властивостей даного класу речовин.

Матеріали та методи. Як вихідні сполуки були використані ацетогідразид та попередньо синтезований 2-метоксифенілізотїоціанат, взаємодія та наступне перетворення яких призводило до одержання 4-(2-метоксифеніл)-5-метил-1,2,4-триазол-3-тіолу. Сформований продукт було залучено до реакції з анілідами хлороетанової кислоти. Будова продуктів хімічного перетворення була підтверджена елементним аналізом, ¹H ЯМР спектроскопією, індивідуальність – хромато-мас-спектрометрією.

Використання *in silico* методів дозволило визначити параметри безпеки та нешкідливості (програмне забезпечення T.E.S.T.). Докінг-аналіз (AutoDockTools/Vina, Open Babel) допоміг оцінити можливий вплив на циклооксигеназу-1 та 2, ланостерол 14 α -деметилазу та кіназу анапластичної лімфоми (Protein Data Bank). Он-лайн платформа SwissADME дозволила визначити фармакокінетичний профіль, ряд фізико-хімічних параметрів та відповідність необхідним критеріям лікоподібності.

Результати. Створені 2-(5-метил-4-(2-метоксифеніл)-1,2,4-триазол-3-ілтїо)ацетаміди були попередньо окреслені як малотоксичні сполуки з невисокими ризиками мутагенності. Рівень відповідності критеріям лікоподібності у більшості випадків оцінений як задовільний. Найбільший вплив серед зазначених ферментів за результатами докінгу зазнає ланостерол 14 α -деметилаза, незначно менший - циклооксигенази-1 та 2 та найменший – кіназа анапластичної лімфоми. Одержані дані були підкріплені показниками мінімальної енергії взаємодії з активними центрами відповідних ферментів.

Висновки. 2-(5-Метил-4-(2-метоксифеніл)-1,2,4-триазол-3-ілтїо)ацетаміди є перспективним джерелом створення біологічно активних субстанцій з протигрибковою та протизапальною активностями і можуть бути використані у подальших дослідженнях.

СПРЯМОВАНИЙ ПОШУК БІОЛОГІЧНО-АКТИВНИХ СПЛУК СЕРЕД ПРОДУКТІВ МОДИФІКАЦІЇ 3-R'-6-(ХЛОРО(R')МЕТИЛ)-2Н-[1,2,4]ТРИАЗИНО[2,3-с]ХІНАЗОЛІН-2-ОНІВ

Грицак О.А.

Науковий керівник: к.фарм.н.,доц. Шабельник К.П.

Кафедра фармацевтичної, органічної та біоорганічної хімії.

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет.

Невпинний розвиток сучасної медицини та фармації потребує постійного оновлення арсеналу засобів фармакотерапії, що в свою чергу обумовлює розширення та удосконалення підходів до розробки інноваційних лікарських засобів. Одним з методів пошуку нових біоактивних молекул є високоефективний скринінг масивних комбінаторних бібліотек речовин з метою виявлення та подальшої оптимізації сполук лідерів. Синтез