

Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра загальної хімії
Українське товариство медичної хімії

Ministry of health of Ukraine
Ministry of education and science of Ukraine
National university of pharmacy
Pharmaceutical chemistry department
General chemistry department
Ukrainian Society of Medicinal Chemistry

MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES

Матеріали
Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,
7 листопада 2025 року

Materials
of the International Internet Conference ‘Modern chemistry of medicines’,
November 7, 2025

ХАРКІВ
KHARKIV
2025



***In silico* дослідження 6-R-5-(теофілін-7-іл)-[1,2,4]триазоло[3,4-*b*][1,3,4]-тіадіазолів**

Андрій Гоцуля

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет, м. Запоріжжя, Україна
andrey.goculya@gmail.com

Вступ. Векторна гетерилгібридизація цільових продуктів хімічного перетворення дозволяє сформулювати практично значимий шлях одержання біологічно активних субстанцій. Обґрунтовано доцільним виглядає залучення до цього процесу азагетероциклічних систем. Особливо привабливими в цьому аспекті виглядають синтони 1,2,4-триазолу та теофіліну, які характеризуються значним фармакологічним потенціалом

Мета роботи передбачала комплексне *in silico* дослідження фармакокінетичних та фармакодинамічних параметрів 6-R₁-5-(теофілін-7-іл)-[1,2,4]триазоло[3,4-*b*][1,3,4]тіадіазолів з наступною оцінкою перспектив створення на їх основі біологічно активних субстанцій.

Матеріали та методи. Дослідження здійснювались із застосуванням програмного пакету TEST (оцінка токсичності), онлайн-сервісу SwissADME (визначення фармакокінетичних і фармакодинамічних параметрів), а також методів молекулярного докінгу для визначення спорідненості з активними центрами пептидної деформілази, ланостерол 14α-деметилази, циклооксигенази-2 та кінази анапластичної лімфоми. Докінг виконували з використанням програм AutoDockTools і AutoDock Vina, дані ферментів одержано з бази Protein Data Bank.

Результати та обговорення. *In silico* оцінка токсичності показала, що досліджені 6-R₁-5-(теофілін-7-іл)-[1,2,4]триазоло[3,4-*b*][1,3,4]тіадіазоли предиктивно визначаються як помірно- або малотоксичні речовини. Імовірність прояву мутагенної активності є низькою. Визначені фізико-хімічні параметри (молекулярна маса, кількість акцепторів та донорів водневих зв'язків, топологічна площа полярної поверхні, молекулярна рефракція, розчинність, гнучкість структури) свідчать про сприятливий вплив на фармакокінетичні властивості. Для більшості сполук прогнозується добра шлунково-кишкова абсорбція та відсутність проникності через гематоенцефалічний бар'єр. Встановлено, що сполуки в більшості випадків впевнено долають обмеження, які встановлюються фільтрами Ліпінського, Гозе, Вебера, Ігана, Мугге та Бренка, що підтверджує їхню «drug-like» придатність. Крім того, спостерігається низька ймовірність хибно-позитивних результатів у біологічних тестах. Результати докінгових досліджень підтверджують потенціал 6-R₁-5-(теофілін-7-іл)-[1,2,4]триазоло[3,4-*b*][1,3,4]тіадіазолів як кандидатів із антимікробною, протигрибковою, протизапальною та протираковою активностями.

Висновки. 6-R₁-5-(теофілін-7-іл)-[1,2,4]триазоло[3,4-*b*][1,3,4]тіадіазоли становлять обґрунтовано перспективний ряд сполук для створення біологічно активних субстанцій.

Список літератури

1. Fedotov S.O., Hotsulia A.S. Synthesis and properties of S-derivatives of 4-amino-5-(5-methylpyrazol-3-yl)-1,2,4-triazole-3-thiol. *Current issues in pharmacy and medicine: science and practice*. 2021; 14(3): 268-274.
2. Safonov A. Method of synthesis novel N'-substituted 2-((5-(thiophen-2-ylmethyl)-4H-1,2,4-triazol-3-yl)thio)acetohydrazides. *Journal of Faculty of Pharmacy of Ankara University*. 2020; 44(2): 242-252.
3. Shcherbyna R, Panasenko O, Polonets O, Nedorezaniuk N, Duchenko M. Synthesis, antimicrobial and antifungal activity of ylidenhydrazides of 2-((4-R-5-R₁-4H-1,2,4-triazol-3-yl)thio)acetaldehydes. *Journal of Faculty of Pharmacy of Ankara University*. 2021; 45(3): 504-514.



Виноград дівочий п'ятилисточковий: відомі дані та перспектива досліджень	93
Анастасія Волкова, Вікторія Георгіянц, Ольга Михайленко	
Комплексний аналіз фітохімічного складу та біологічної активності екстрактів <i>Centella asiatica</i>.....	94
Єлизавета Ворожко	
Молекулярний дизайн та синтез дифармафорних систем: гібриди небрацетаму й тіофенітоїну як потенційні ноотропні агенти.....	95
Андрій Воронович, Антон Семенець, Анастасія Ющенко, Наталія Коваль, Ірина Журавель Сергій М. Коваленко	
Розробка нової аналітичної стратегії контролю супровідних домішок нафтифіну гідрохлориду після невдалої валідації	96
Олександра Гавриленко, Лілія Логойда	
Перспективи використання ізохолінових алкалоїдів для профілактики та лікування нейродегенеративних захворювань	97
Дар'я Германова, Вікторія Георгіянц	
Синтез, властивості, хімічні перетворення та антимікробна активність ряду похідних 5-амінометилена-2-тіоксотіазолідин-4-ону та 4-гідрокси-2-(алкілтіо)тіазол-5-карбальдегідів	99
Сергій Голота, Тетяна Руминська, Назар Солодяк, Ігор Юшин, Олександра Роман, Ірина Коваленко, Роман Лесик	
Валідація ВЕРХ-методики кількісного визначення бензидаміну, лідокаїну та метилпарабену у комбінованому препараті	100
Оксана Гончар, Василь Чорний, Ольга Головченко, Вікторія Георгіянц	
Розробка ВЕРХ методик визначення тетрациклінів в лікарських формах	101
Маріна Гончар, Мар'яна Горин, Лілія Логойда	
Quality by Design – керована розробка ВЕРХ методик визначення аналітів з групи блокаторів кальцієвих каналів в лікарських засобах та модельних сумішах	102
Мар'яна Горин, Лілія Логойда	
Причини та наслідки отруєння сертраліном.....	103
Наталія Горлачук, Юлія Маляр	
<i>In silico</i> дослідження 6-R-5-(теофілін-7-іл)-[1,2,4]тріазоло[3,4-<i>b</i>][1,3,4]-тіадіазолів	104
Андрій Гоцуля	
Токсикологічний профіль CO₂-екстракту грейпфрута у складі детокс-лінійки засобів для волосся.....	105
Крістіна Гуленко, Тетяна Бойчук, Галина Біла, Надія Антрапцева	
Перспективи застосування тонконогу очеретяного у доказовій медицині	106
Крістіна Гуліян, Ірина Журавель	
Контроль якості косметичного гелю за фізико-хімічними показниками	107
Софія Гура, Галина Біла, Надія Антрапцева	
Антиоксидантні властивості карбонових квантових точок, синтезованих із сечовини та лимонної кислоти.....	108
Ігор Даниленко, Вікторія Лижнюк, Анастасія Бегдай, Вадим Лісовий, Андрій Гой, Володимир Бессарабов	