

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



Антиоксидантний потенціал похідних 5-R-3-тіо-1,2,4-тріазолу в умовах оксидативного стресу

Ісайчева К. К., Каплаушенко А. Г., Самелюк Ю. Г.

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

ksuconverse@gmail.com, sameluk_yurii@ukr.net

Вступ.

Сучасні умови життя, зокрема війна, що триває в Україні, супроводжуються глибокими фізіологічними, психологічними та біохімічними змінами в організмі людини. Однією з ключових ланок патогенезу стресу, гіпоксії, травм, інфекційних захворювань та навіть тривалої тривожності є розвиток оксидативного стресу, викликаного надмірним накопиченням активних форм кисню. У нормальних умовах антиоксидантні системи організму (глутатіон, супероксиддисмутаза, каталаза тощо) ефективно нейтралізують вільні радикали, однак під дією хронічного стресу цей баланс порушується.

Оксидативний стрес сприяє ушкодженню клітинних мембран, білків, ДНК, що зумовлює розвиток запальних, дегенеративних і карциногенних процесів. У зв'язку з цим, пошук нових антиоксидантних сполук з вираженою біологічною активністю є актуальним завданням сучасної фармацевтичної науки.

Особливу увагу привертають похідні 1,2,4-тріазолу – п'ятичленного гетероциклу з трьома атомами азоту. Цей фрагмент відомий як фармакофор, присутній у численних лікарських засобах із протизапальними, протимікробними, протигрибковими, протисудомними та антиоксидантними властивостями. Особливо перспективними є сполуки з тіольним або тіоестерним заміщенням у 3 положенні, що здатні забезпечувати реакційну здатність до відновлення вільних радикалів.

Мета.

Визначити структуру–активність–залежності в серії нових похідних 5-R-3-тіо-1,2,4-тріазолу з метою виявлення ефективних з'єднань з антиоксидантними властивостями, потенційно придатних для фармакологічної корекції наслідків оксидативного стресу в умовах воєнного часу.

Матеріали та методи.

Дослідження проводили на серії синтезованих у лабораторії гетероциклічних сполук – похідних 5-R-3-тіо-1,2,4-тріазолу, які містили різні електронодонорні та електроноакцепторні замісники у 4 та 5 положеннях тріазольного кільця.

Для оцінки антиоксидантної активності застосовували ряд стандартних методик:

- Метод відновлення іонів Fe^{3+} до Fe^{2+} (редукуюча здатність);
- Тест нейтралізації радикалу DPPH (2,2-дифеніл-1-пікрилгідазил);
- Визначення інгібування перекисного окиснення ліпідів у моделях біомембран.

Порівняльний аналіз проводили з відомими антиоксидантами – аскорбіновою кислотою, кверцетином та тіотриазоліном.

Результати та їх обговорення.

Серед досліджених сполук найбільшу активність проявили ті, що містили вільну SH-групу або її похідні (етилтіо-, ацетилтіо- та тіоетанова кислота). Це пояснюється високою реакційною здатністю тіольних груп, які можуть безпосередньо взаємодіяти з вільними радикалами, утворюючи стабільні дисульфідні містки.



Також встановлено, що наявність донорних електронів (наприклад, метоксигруп, аміногруп) в 4 положенні тріазолу сприяє стабілізації радикальної форми молекули, що продовжує її антиоксидантну дію. Натомість замісники з акцепторними властивостями (нітро-, хлор-) знижували активність.

Позитивна кореляція виявлена між ліпофільністю сполуки (LogP) і її здатністю до інгібування пероксидного окиснення ліпідів. Це свідчить про доцільність використання більш ліпофільних похідних для захисту мембранних структур клітин.

Деякі з нових сполук перевищували активність тіотриазоліну в тестах на DPPH і редукуючу здатність, що відкриває перспективи їх подальших доклінічних досліджень як потенційних засобів у терапії посттравматичного стресу, ішемічних ушкоджень, токсикозів та інших станів, пов'язаних з оксидативним ушкодженням.

Висновки.

1. Похідні 5-R-3-тіо-1,2,4-тріазолу є перспективними сполуками для створення нових лікарських засобів з антиоксидантними властивостями.
2. Найбільш активні молекули містили тіольну групу або її похідні у 3 положенні, а також електронодонорні замісники у 4 положенні тріазольного ядра.
3. Виявлено структуру–активність-залежності, що дозволяють спрямовано модифікувати будову для підвищення антиоксидантної ефективності.
4. Отримані результати свідчать про потенціал цих сполук для фармакологічного захисту організму в умовах оксидативного стресу, зокрема внаслідок стресогенних і гіпоксичних факторів війни.

Ключові слова: 5-R-3-тіо-1,2,4-тріазол, антиоксидантна активність, тіольна група, оксидативний стрес, воєнні фактори.



Флавоноїди <i>Ginkgo biloba</i>: сучасні методи аналізу та напрямки подальших досліджень	109
Галина Данчук, Ірина Івануса, Марія Михалків, Ольга Ковальська	
Синтез та вивчення анальгетичної дії похідних 3-морфоліл-4-арил-2-ариламініотіазолу	110
Ірина Драпак., Ліна Перехода, Борис Зіменковський, Наталія Серединська	
Розробка ВЕРХ методики визначення еналаприлу в таблетках з використанням солей хаотропних аніонів	111
Мар'яна Дручок, Лілія Логойда	
Контроль якості рослинної сировини на вміст нітратів	112
Олександр Дудчак, Галина Біла, Надія Антрапцева	
Новий протівірусний активний фармацевтичний інгредієнт – Тріазтіапірафлуравір (Triazthiapyrafluravir) для терапії COVID-19	113
Лариса Євсєєва, Олександр Кириченко, Катерина Логачева, Анна Гелеверя, Володимир Іванов, Сергій Коваленко, Олег Калугін	
Обґрунтування фармацевтичної розробки лікарських засобів на основі магнію L-треонату	114
Наталія Жидик, Олена Бєвз, Ольга Криванич	
Синтез та прогнозування антигіпертензивної активності несиметричних аналогів ніфедипіну	115
Ірина Журавель, Анна Гелеверя, Сергій Коваленко, Ігор Білов, Олександр Кириченко, Світлана Карпова	
Розробка складу зубної пасти та стандартизоване визначення у ній загального вмісту фтору	116
Владислав Заєць, Ілля Ресницький, Вадим Лісовий, Тетяна Макачук, Галина Кузьміна, Володимир Бессарабов	
Використання кислотних азобарвників в токсикологічному скринінгу лікарських речовин	117
Денис Захарченко, Сергій Баюрка	
Аналітичне супроводження фармацевтичної розробки крему дилтіазему	118
Ігор Зінченко, Олена Безугла, Ігор Вишневський, Микола Ляпунов, Олексій Лисокобилка, Анна Ляпунова, Юрій Столпер	
Наночастинки TiO_2 як модулятори скорочень гладеньких м'язів аорти	119
Зуб Платон, Ольга Цимбалюк, Сергій Чуніхін, Тамара Давидовська, Іван Войтешенко, Валерій Скришевський	
Синтез та оцінка біологічної активності нових гетероциклічних сполук з тіопірано[2,3-d]тіазол-2-тіоновим скаффолдом	120
Оксана Іванців, Сергій Голота, Тетяна Руминська, Ігор Юшин, Ірина Коваленко, Роман Лесик	
Антиоксидантний потенціал похідних 5-R-3-тіо-1,2,4-тріазолу в умовах оксидативного стресу	121
Ісайчева К. К., Каплаушенко А. Г., Самелюк Ю. Г.	