

КНУТД



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Київський національний університет технологій та дизайну
Факультет хімічних та біофармацевтичних технологій

**«ІННОВАЦІЙНІ МАТЕРІАЛИ ТА ТЕХНОЛОГІЇ:
БІОТЕХНОЛОГІЯ, ПРИКЛАДНА ХІМІЯ,
ЕКОЛОГІЯ»**

ЗБІРНИК ТЕЗ

II Міжнародної науково-практичної конференції,
присвяченої 95-річчю
Київського національного університету технологій та дизайну

*УКРАЇНА, КИЇВ, КНУТД
30-31 ЖОВТНЯ 2025 р.*

3	CO-COMPOSTING OF TANNERY LIMING SLUDGE AND WASTE SHEEP WOOL FOR AGRICULTURAL USE <i>Md. Enamul Hasan Zahin, Md. Abul Hashem, Md. Mukimujjaman Miem, Md. Taskin Alam Niaz, Tanzila Parvin Ame, Sangida Iqbal</i>	112
4	DETERMINATION OF FAT-SOLUBLE VITAMINS IN CORN OIL MACERATES OF <i>HYPERICUM PERFORATUM</i> AND <i>MATRICARIA RECUTITA</i> <i>Oleksandra Kunyk, Vasyl Pasichniy</i>	113
5	DES-ASSISTED ELECTRODEPOSITION OF ELECTROCATALYSTS FOR GREEN HYDROGEN PRODUCTION <i>Shaiderov D.A., Levanyuk O.O., Sukhatskyi O.D., Protsenko V.S.</i>	114
6	RHEOLOGICAL PROPERTIES OF HIGHLY FILLED EPOXY COMPOSITES <i>Pomirko O., Kucherenko A., Pokhmurska A., Moravskiy V.</i>	115
7	SPECTRAL ANALYSIS OF THE STRUCTURING PROCESS OF EPOXY-OLIGESTER COMPOSITIONS <i>N. Choryk, V. Zemke, M. Bratyshak</i>	116
8	THE ECONOMIC ADVANTAGES OF THE CIRCULAR ECONOMY IN THE TANNING INDUSTRY <i>Monika Flisek, Nataliia Popovych, Boguslaw Wozniak</i>	117
9	THE INFLUENCE OF FOOTWEAR UPPER MATERIALS ON INNER MICROCLIMATE <i>Zbigniew Mikołajczyk, Boguslaw Woźniak, Nataliia Popovych</i>	118
10	ДОСЛІДЖЕННЯ ПЕРСПЕКТИВНОСТІ СТВОРЕННЯ ПОТЕНЦІЙНИХ АФІ НА БАЗІ 4-(АМІН; МЕТИЛ)-5-(ХІНОЛІН-2-ІЛ)-4Н-1,2,4-ТРІАЗОЛ-3-ТІОЛУ(АМІНУ) ЗА ДОПОМОГОЮ АДМЕ-ПРОГНОЗУВАННЯ <i>Довбня Д. В., Каплаушенко А. Г., Саліонов В. О.</i>	119
11	ОДЕРЖАННЯ ЕФЕКТИВНИХ СОРБЕНТІВ ІЗ ВІДХОДІВ ВИРОБНИЦТВ <i>Худоярова О.С., Немировська А.Ю., Манченко І.В.</i>	120
12	ЕЛЕКТРОХІМІЧНЕ ПОЛІРУВАННЯ НЕРЖАВНОЇ СТАЛІ 12Х18Н10Т В ЕВТЕКТИЧНИХ ІОННИХ РІДИНАХ ETHALINE ТА RELINE <i>Махота Д.О., Бутиріна Т.Є., Проценко В.С.</i>	121
13	МУЛЬТИМАТЕРІАЛЬНІ ПОЛІМЕРНІ СИСТЕМИ ДЛЯ АДИТИВНИХ ТЕХНОЛОГІЙ <i>Слепцов О. О., Савченко Б. М.</i>	122
14	«ЗЕЛЕНІ» ІНГІБІТОРИ КОРОЗІЇ – ПЕРСПЕКТИВНИЙ НАПРЯМ ЕКОЛОГІЗАЦІЇ ВИРОБНИЦТВ <i>Петруша Ю.Ю.</i>	123
15	ПЕРЕРОБЛЕННЯ ПОЛІМІНЕРАЛЬНИХ РУД ПРИКАРПАТТЯ МЕТОДАМИ СУЛЬФАТНОГО ВИЛУГОВУВАННЯ <i>Іванченко Л.В., Кожухар В.Я., Брем В.В., Повзло Н.М.</i>	124
16	ОЦІНКА ВПЛИВУ НА НАВКОЛИШНЄ СЕРЕДОВИЩЕ ВЕРХ МЕТОДИКИ КІЛЬКІСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АФІ НАТРІЙ 2-((4-АМІНО-5-ТІОФЕН-2-ІЛМЕТИЛ)-4Н-1,2,4-ТРІАЗОЛ-3-ІЛ)ТІО)АЦЕТАТУ <i>Усенко Д. Л., Каплаушенко А. Г.</i>	125
17	ХІМІЯ ВОДИ І ФАРМАЦЕВТИЧНЕ ВИРОБНИЦТВО <i>Омельченко П.С.</i>	126
18	ОЧИЩЕННЯ БІОГАЗУ ВІД СІРКОВОДНЮ <i>Голубєв П.А., Слюзар А.В.</i>	127
19	РОЗРОБКА СКРИНІНГОВОЇ МОДЕЛІ ДЛЯ ІДЕНТИФІКАЦІЇ АГОНІСТІВ РЕЦЕПТОРА OX2R <i>Морозова В.О., Прудь М.В.</i>	128
20	АНОДНИЙ МАТЕРІАЛ ВИСОКОЇ ЧИСТОТИ НА ОСНОВІ ПРИРОДНОГО ГРАФІТУ ДЛЯ ЛІТІЙ-ІОННИХ АКУМУЛЯТОРІВ <i>Хоменко В.Г., Макєєва І.С., Кислова О.В., Нікулін Д.О., Іратхе де Меаца, Памела Смечеллато</i>	129

**ДОСЛІДЖЕННЯ ПЕРСПЕКТИВНОСТІ СТВОРЕННЯ ПОТЕНЦІЙНИХ АФІ НА
БАЗІ 4-(АМІН; МЕТИЛ)-5-(ХІНОЛІН-2-ІЛ)-4Н-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОЛУ(АМІНУ)
ЗА ДОПОМОГОЮ ADME-ПРОГНОЗУВАННЯ**

Довбня Д. В., Каплашенко А. Г., Саліонов В. О.

*Запорізький державний медико-фармацевтичний університет
dima.dovbnya@ukr.net*

Тріазольні та хінолінові похідні привертають значну увагу сучасної фармацевтичної галузі завдяки їхній широкій біологічній активності, включно з антимікробною, протипухлинною та протизапальною дією. Комбінування цих гетероциклічних фрагментів у межах однієї молекули розглядається як перспективний напрям створення нових активних фармацевтичних інгредієнтів (АФІ). Для попереднього відбору найбільш перспективних сполук доцільним є застосування *in silico* ADME-прогнозування, що дозволяє оцінити ключові фармакокінетичні властивості ще на доклінічному етапі.

Мета дослідження. Вивчення фармакокінетичних та медико-хімічних характеристик 4-(амін; метил)-5-(хінолін-2-іл)-4Н-1,2,4-тріазол-3-тіолу(аміну) для визначення їхньої придатності як потенційних АФІ.

Результати та обговорення. Згідно з результатами ADME-прогнозування, усі досліджені сполуки характеризуються високою кишковою абсорбцією, проте не проникають через гематоенцефалічний бар'єр. Більшість похідних не є субстратами P-gp, за винятком 5-(хінолін-2-іл)-4Н-1,2,4-тріазол-3-аміну, що свідчить про низький ризик активного виведення з клітин. Встановлено, що всі досліджувані сполуки здатні інгібувати CYP1A2, а тіол- та метилпохідні також виявляють потенційну інгібуючу дію на CYP3A4, що може бути підґрунтям для ймовірних лікарських взаємодій. Водорозчинність молекул оцінена як задовільна (від «soluble» до «moderately soluble»), що підтверджує можливість формування достатнього рівня біодоступності. Важливим є те, що всі сполуки відповідають правилам Ліпінські, Гоце, Вебера, Егана та Мюгге, а їхній показник біодоступності становить 0.55, що відповідає середньому рівню для низькомолекулярних органічних сполук. Низькі значення синтетичної складності (2.02–2.40) свідчать про відносну легкість одержання досліджуваних молекул. Особливої уваги заслуговують аміно- та метилпохідні, які поєднують оптимальний баланс ліпофільності (LogPo/w 1.2–2.1) та площі полярної поверхні (80–108 Å²), що вказує на їхню потенційну пероральну активність.

Висновки. Отримані результати свідчать, що досліджувані 4-(амін; метил)-5-(хінолін-2-іл)-4Н-1,2,4-тріазол-3-тіол(амін) відповідають основним критеріям «drug-likeness» і можуть розглядатися як перспективні молекули для подальших доклінічних досліджень.