

Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національна академія наук України
Національна академія медичних наук України
Державний експертний центр МОЗ України
Державна служба України з лікарських засобів
Управління лікарських засобів та медичної продукції МОЗ України
Харківська обласна державна адміністрація
Харківська міська рада
Національний фармацевтичний університет
Аптечна професійна асоціація України
Міжнародний благодійний фонд сприяння розвитку медичної
та фармацевтичної науки і освіти «Ланцет»
Європейський директорат з якості ліків та медичної допомоги
Європейське товариство клінічної фармації

Клінічна фармація: 20 років в Україні

МАТЕРІАЛИ НАЦІОНАЛЬНОГО КОНГРЕСУ

(Харків, 21–22 березня 2013 року)

Харків
2013

**ПРОГНОЗУВАННЯ ГОСТРОЇ ТОКСИЧНОСТІ
ПОХІДНИХ 1,2,4-ТРІАЗОЛУ
У ПРОГРАМІ GUSAR ONLINE**

*І.М. БІЛАЙ, Є.О. МИХАЙЛЮК,
А.Г. КАПЛАУШЕНКО, А.С. ГОЦУЛЯ*
Запорізький державний медичний університет,
м. Запоріжжя, Україна

На сьогоднішній день важливим етапом створення нового лікарського засобу є прогнозування його токсичності за допомогою інформаційних технологій.

Матеріали та методи. Нами була використана програма GUSAR (GUSAR) з джерела <http://pharmaexpert.ru/GUSAR/acutoxpredict.html>. GUSAR включає в себе останні досягнення в області QSAR моделювання: узгодженість прогнозу, оцінка застосовності області, внутрішні та зовнішні перевірки моделей і чітка інтерпретація отриманих результатів.

Проведено прогнозування гострої токсичності 37 хімічних сполук серед похідних 4-(алкіл, арил, гетерил)-5-(алкіл, арил, гетерил)-1,2,4-тріазолу. Дослідженні речовини належать до різних класів хімічних сполук. Згідно з отриманими даними всі сполуки належать до 3, 4 та 5 класів токсичності за класифікацією К.К. Сидорова. Показники ЛД₅₀ при внутрішньо очеревиному шляху введення знаходилися в межах від 272,700 (речовина 2.8) до 1462,0 мг/кг (речовина 2.6). Значення ЛД₅₀ при внутрішньовенному введенні знаходилися в межах від 36,87 (речовина 2.12) до 514,1 мг/кг (речовина 2.2). Показники ЛД₅₀ при підшкірному введенні становили від 186,9 (речовина 2.1) до 2640,0 мг/кг (речовина 2.25). Показники ЛД₅₀ при пероральному шляху введенні знаходилися в межах від 259,3 (речовина 2.1) до 1964,0 мг/кг (речовина 2,9).

Результати проведеної роботи дали змогу спрогнозувати показники гострої токсичності для 37 нових хімічних сполук при різних шляхах введення.