



**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**

**86 ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ  
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ ТА СТУДЕНТІВ З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ**

**«АКТУАЛЬНІ ПИТАННЯ  
СУЧАСНОЇ МЕДИЦИНИ ТА ФАРМАЦІЇ - 2026»**

**14-15 травня 2026 року**



**ЗАПОРІЖЖЯ – 2026**

|                                                                                                                                                                                                       |            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| АД'ЮВАНТНИЙ ПОТЕНЦІАЛ КОНДИЦІЙОВАНОГО СЕРЕДОВИЩА МЕЗЕНХІМАЛЬНИХ СТОVBУРОВИХ КЛІТИН У ПІДВИЩЕННІ ЗНЕБОЛЮЮЧОЇ АКТИВНОСТІ ЦЕЛЕКОКСИБУ ПРИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОМУ АРТРИТІ.....                                | 305        |
| <i>Дробнер І.Г., Гладких Ф.В., Студент В.О.</i>                                                                                                                                                       |            |
| FORMATION OF MITOCHONDRIAL DYSFUNCTION IN POST-TRAUMATIC STRESS SYNDROME AND PHARMACOLOGICAL STRATEGIES FOR ITS CORRECTION .....                                                                      | 306        |
| <i>Samoilenko T.</i>                                                                                                                                                                                  |            |
| АНАЛІЗ ДОСВІДУ ЗАСТОСУВАННЯ ФАРМАКОЛОГІЧНИХ ПІДХОДІВ ДО КОРЕКЦІЇ СТРЕСУ СЕРЕД СТУДЕНТІВ.....                                                                                                          | 307        |
| <i>Мельничук А.І.</i>                                                                                                                                                                                 |            |
| ФАРМАКОТЕРАПІЯ АРТЕРІАЛЬНОЇ ГІПЕРТЕНЗІЇ ІНГІБІТОРАМИ АПФ. СУЧАСНИЙ ПОГЛЯД .....                                                                                                                       | 309        |
| <i>Янчій В.В.</i>                                                                                                                                                                                     |            |
| <b>РОЗРОБКА ТА СТВОРЕННЯ ЛЗ .....</b>                                                                                                                                                                 | <b>311</b> |
| АЛКІЛПОХІДНІ 7-((3-МЕРКАПТО-4-ЕТИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ-5-ІЛ)МЕТИЛ)-3-МЕТИЛКСАНТИНУ: <i>IN SILICO</i> ADME, ТОКСИКОЛОГІЧНИЙ ТА ДОКІНГ-СКРИНІНГ .....                                                         | 311        |
| <i>Панасенко М. О., Британова Т. С.</i>                                                                                                                                                               |            |
| ТРАНСБУКАЛЬНІ ПЛІВКИ: СУЧАСНИЙ СТАН ТА ПЕРСПЕКТИВИ ЗАСТОСУВАННЯ У ФАРМАКОТЕРАПІЇ.....                                                                                                                 | 312        |
| <i>Безик Д.Ю.</i>                                                                                                                                                                                     |            |
| PHARMACOLOGICAL ACTIVITY EVALUATION OF 2-((4-((4-FLUOROBENZYL)AMINO)-5-(PYRIDIN-2-YL)-4H-1,2,4-TRIAZOL-3-YL)THIO)-1-R-ETHANONES VIA <i>IN SILICO</i> METHODS .....                                    | 313        |
| <i>Tayeb ED DOUCH</i>                                                                                                                                                                                 |            |
| ВИЯВЛЕННЯ ПЕРСПЕКТИВНИХ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ СПОЛУК У РЯДУ 2-((4-((4-БРОМБЕНЗИЛ)АМІНО)-5-(ПІРИДИН-2-ІЛ)-4H-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІЛ)ТІО)-1-R-ЕТАНОНІВ .....                                                  | 314        |
| <i>Ель Хамді Нур ЕльХуда</i>                                                                                                                                                                          |            |
| <b>СИНТЕЗ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН.....</b>                                                                                                                                                        | <b>315</b> |
| РОЛЬ ЕКСОСОМ В ДІАГНОСТИЦІ ТА ЛІКУВАННІ ОНКОЛОГІЧНИХ ЗАХВОРЮВАНЬ .....                                                                                                                                | 315        |
| <i>Шакер А.О.</i>                                                                                                                                                                                     |            |
| РАЦІОНАЛЬНЕ КОНСТРУЮВАННЯ ГІБРИДНИХ ПОХІДНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛУ ТА ОРОТОВОЇ КИСЛОТИ ЯК ПЕРСПЕКТИВНИХ РЕГУЛЯТОРІВ РЕПАРАТИВНИХ ПРОЦЕСІВ.....                                                               | 316        |
| <i>Карпенко Ю.В.</i>                                                                                                                                                                                  |            |
| 1,2,4-ТРИАЗОЛИ ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ ФАРМАКОФОРИ В МЕДИЧНІЙ ХІМІЇ .....                                                                                                                                     | 317        |
| <i>Федотов С. О.</i>                                                                                                                                                                                  |            |
| СПРЯМОВАНИЙ ПОШУК ПРОТИЗАПАЛЬНИХ ЗАСОБІВ СЕРЕД НОВИХ ПОХІДНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНИХ КАРБОНОВИХ КИСЛОТ .....                                                                                                 | 318        |
| <i>Савченко К.Ю., Скорина Д.Ю.</i>                                                                                                                                                                    |            |
| <i>IN SILICO</i> ОЦІНКА ФАРМАКОКІНЕТИЧНОГО ПРОФІЛЮ ТА БІОЛОГІЧНОЇ БЕЗПЕКИ НОВИХ ПОХІДНИХ 4-ІДЕНАМІНО-5-(ХІНОЛІН-2-ІЛ)-3-ТІО-1,2,4-ТРИАЗОЛУ .....                                                      | 319        |
| <i>Довбня Д. В., Каплаушенко А. Г.</i>                                                                                                                                                                |            |
| SEARCH FOR NEW COUMARIN DERIVATIVES AS POTENTIAL ANTIDEPRESSANT AGENTS.....                                                                                                                           | 320        |
| <i>Shtyl Tetiana<sup>1</sup></i>                                                                                                                                                                      |            |
| SYNTHESIS AND PREDICTION OF PHARMACOKINETIC PARAMETERS OF SALTS OF 2-((5-(2-BROMO-5-METHOXYPHENYL)-4-R-1,2,4-TRIAZOL-3-YL)THIO)ACETIC ACIDS .....                                                     | 321        |
| <i>Skoryi M. P.</i>                                                                                                                                                                                   |            |
| SYNTHESIS AND <i>IN SILICO</i> EVALUATION OF THE BIOLOGICAL PROPERTIES OF SALTS OF 2-((5-((1H-INDOL-3-YL)METHYL)-4-((5-NITROFURAN-2-YL)METHYLENE)AMINO)-4H-1,2,4-TRIAZOL-3-YL)THIO)ETHANOIC ACID..... | 322        |
| <i>Fedotov S. O.</i>                                                                                                                                                                                  |            |
| <b>АНАЛІТИЧНА, ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ, СТАНДАРТИЗАЦІЯ ЛЗ .....</b>                                                                                                                                       | <b>323</b> |
| РОЗРОБКА МЕТОДИКИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АНА-КИСЛОТ В ЗАСОБАХ ЛІКУВАЛЬНОЇ КОСМЕТИКИ .....                                                                                                   | 323        |
| <i>Бойків Т.Я.</i>                                                                                                                                                                                    |            |

# SYNTHESIS AND PREDICTION OF PHARMACOKINETIC PARAMETERS OF SALTS OF 2-((5-(2-BROMO-5-METHOXYPHENYL)-4-R-1,2,4-TRIAZOL-3-YL)THIO)ACETIC ACIDS

Skoryi M. P.

Scientific supervisor: D. Pharm Sc, Prof. Shcherbyna R. O.

Department of Toxicological and Inorganic Chemistry  
Zaporizhzhia State Medical and Pharmaceutical University

**Introduction.** The development of new medicinal products is an important area of modern scientific research. The use of highly specialized equipment and advanced screening approaches significantly accelerates the identification of lead compounds that subsequently undergo the full drug development cycle. The main sources of such compounds include synthetic and natural substances, endogenous ligands, and metabolites.

The prospects of 1,2,4-triazoles are determined by the wide possibilities for their chemical modification and combination with various pharmacophoric fragments, which promotes the development of biologically active, polypharmacological, and low-toxicity derivatives. Numerous examples of active triazole-based molecules containing fragments of natural compounds are known. In this regard, the synthesis and investigation of multifunctional 1,2,4-triazole derivatives, as well as the establishment of “structure–pharmacological activity” relationships, represent a relevant and promising area of research.

**Aim of the study.** To carry out the targeted synthesis of inorganic and organic salts of 2-((5-(2-bromo-5-methoxyphenyl)-4-R-1,2,4-triazol-3-yl)thio)acetic acids in order to improve their hydrophilicity and to predict their oral bioavailability.

**Materials and methods.** The initial compounds were 2-((5-(2-bromo-5-methoxyphenyl)-4-R-1,2,4-triazol-3-yl)thio)acetic acids (R = methyl, ethyl, phenyl), synthesized using a standard thiol alkylation procedure with chloroacetic acid. Salt formation was performed by neutralization of the acids with equimolar amounts of bases (NaOH, KOH, diethylamine, morpholine, piperidine) in isopropyl alcohol under moderate heating. ADME parameters and solubility (Log S) were evaluated *in silico* using the SwissADME service. The structures of the salts were confirmed by elemental analysis and  $^1\text{H}$  NMR spectroscopy.

**Results.** Twelve new salt forms were obtained. It was established that the conversion of free acids into their sodium and potassium salts leads to a marked increase in water solubility (10–15-fold according to calculated data). Analysis of Log P (lipophilicity) demonstrated that morpholinium and piperidinium salts exhibit the most balanced properties, combining sufficient hydrophilicity for dissolution in gastric juice with adequate lipophilicity for passive diffusion across enterocyte membranes. According to Lipinski’s rule of five, all synthesized salts show no violations, indicating a high potential for oral drug development. In the  $^1\text{H}$  NMR spectra of the salts, a downfield shift of the methylene group signals ( $-\text{S}-\text{CH}_2-$ ) relative to the parent acids was observed, which is attributed to deprotonation of the carboxyl group and changes in electronic effects.

**Conclusions.** A series of salts of 2-((5-(2-bromo-5-methoxyphenyl)-4-R-1,2,4-triazol-3-yl)thio)acetic acids was synthesized for the first time. The *in silico* modeling results confirm the feasibility of salt formation as an effective approach to modifying the pharmacokinetic profile within this class of compounds. Organic salts with secondary amines are the most promising candidates for further pharmacological studies.