



**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>	
РОЗРОБКА ТА СТВОРЕННЯ ЛЗ	311
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>	
СИНТЕЗ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН.....	315
РОЛЬ ЕКЗОСОМ 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 Tetiana¹</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>	
АНАЛІТИЧНА, ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ, СТАНДАРТИЗАЦІЯ ЛЗ	323
РОЗРОБКА МЕТОДИКИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АНА-КИСЛОТ В ЗАСОБАХ ЛІКУВАЛЬНОЇ КОСМЕТИКИ	323
<i>Бойків Т.Я.</i>	

Висновки: Трансбукальні плівки є сучасною та перспективною лікарською формою, що дозволяє підвищити ефективність фармакотерапії за рахунок покращення біодоступності та зручності застосування. Отримані дані свідчать про доцільність подальших досліджень і розширення їх використання у клінічній практиці.

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 IN SILICO METHODS

Tayeb ED DOUCH

Scientific Supervisor: D. Ph. Sc., Assos. Prof. Andrii SAFONOV

Department of toxicological and inorganic chemistry

Zaporizhzhia state medical and pharmaceutical university

The aim of this work is the theoretical justification and selection of promising 2-((4-((4-fluorobenzyl)amino)-5-(pyridin-2-yl)-4H-1,2,4-triazol-3-yl)thio)-1-R-ethanone derivatives as potential selective COX-2 inhibitors based on a comprehensive in silico study.

Materials and methods. To substantiate the feasibility of further synthesis and in vivo testing, a series of 2-((4-((4-fluorobenzyl)amino)-5-(pyridin-2-yl)-4H-1,2,4-triazol-3-yl)thio)-1-R-ethanone derivatives was selected. Prediction of the pharmacokinetic profile and evaluation of drug-likeness descriptors for the investigated compounds were conducted using the SwissADME web resource. Toxicological screening was performed using the T.E.S.T. software (version 5.1.2), developed by the U.S. EPA. Acute toxicity assessment was based on quantitative structure-activity relationship (QSAR) models.

Results. Pharmacokinetic and ADME profiles of the investigated compounds were evaluated using the SwissADME tool, revealing favorable drug-like properties. These findings indicate that the synthesized 2-((4-((4-fluorobenzyl)amino)-5-(pyridin-2-yl)-4H-1,2,4-triazol-3-yl)thio)-1-R-ethanone derivatives are promising candidates for further in-depth evaluation of their biological activity and toxicological safety. Based on in silico toxicological screening (T.E.S.T. software), the studied compounds were found to belong to Toxicity Class III (slightly toxic substances, rat LD₅₀ (830-1510 mg/kg) and possess low bioaccumulation potential (BCF < 40). Mutagenicity analysis via the Ames test confirmed the genotoxic safety of most mono-substituted derivatives, whereas a positive mutagenic risk is predicted for the unsubstituted compound and dibromo-analogs. Using molecular docking methods (SwissDock server), it was established that the entire series of synthesized 1,2,4-triazole derivatives exhibits high affinity for the COX-2 active site (protein 1CX2). Their binding energy values (ΔG ranging from -6.57 to -7.39 kcal/mol) surpass those of the reference drug, etoricoxib (-6.29 kcal/mol). Efficient interaction of substituents within the selectivity pocket, particularly with *Arg513*, *Val523*, and *His90* residues, plays a crucial role in complex stabilization.

Conclusions. A comprehensive "structure-activity-safety" analysis identified compound 9 (1-R-ethanone, where R = p-tolyl) as the most promising lead candidate. It combines the highest target affinity (-7.39 kcal/mol) with a favorable toxicological profile (absence of mutagenicity and low toxicity), making it a suitable candidate for further in vivo studies.