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 СТОВБУРОВИХ КЛІТИН У ПІДВИЩЕННІ ЗНЕБОЛЮЮЧОЇ АКТИВНОСТІ ЦЕЛЕКОКСИБУ ПРИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОМУ АРТРИТІ ... 305
Дробнер І.Г., Гладких Ф.В., Студент В.О.

FORMATION OF MITOCHONDRIAL DYSFUNCTION IN POST-TRAUMATIC STRESS SYNDROME AND PHARMACOLOGICAL STRATEGIES FOR ITS CORRECTION ... 306
Samoilenko T.

АНАЛІЗ ДОСВІДУ ЗАСТОСУВАННЯ ФАРМАКОЛОГІЧНИХ ПІДХОДІВ ДО КОРЕКЦІЇ СТРЕСУ СЕРЕД СТУДЕНТІВ ... 307
Мельничук А.І.

ФАРМАКОТЕРАПІЯ АРТЕРІАЛЬНОЇ ГІПЕРТЕНЗІЇ ІНГІБІТОРАМИ АПФ. СУЧАСНИЙ ПОГЛЯД ... 309
Янчій В.В.

РОЗРОБКА ТА СТВОРЕННЯ ЛЗ ... 311

АЛКІЛПОХІДНІ 7-((3-МЕРКАПТО-4-ЕТИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ-5-ІЛ)МЕТИЛ)-3-МЕТИЛКСАНТИНУ: *IN SILICO* ADME, ТОКСИКОЛОГІЧНИЙ ТА ДОКІНГ-СКРИНІНГ ... 311
Панасенко М. О., Британова Т. С.

ТРАНСБУКАЛЬНІ ПЛІВКИ: СУЧАСНИЙ СТАН ТА ПЕРСПЕКТИВИ ЗАСТОСУВАННЯ У ФАРМАКОТЕРАПІЇ ... 312
Безик Д.Ю.

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 ... 313
Tayeb ED DOUCH

ВИЯВЛЕННЯ ПЕРСПЕКТИВНИХ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ СПОЛУК У РЯДУ 2-((4-((4-БРОМБЕНЗИЛ)АМІНО)-5-(ПІРИДИН-2-ІЛ)-4*Н*-1,2,4-ТРІАЗОЛ-3-ІЛ)ТІО)-1-R-ЕТАНОНІВ ... 314
Ель Хамді Нур ЕльХуда

СИНТЕЗ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН ... 315

РОЛЬ ЕКЗОСОМ В ДІАГНОСТИЦІ ТА ЛІКУВАННІ ОНКОЛОГІЧНИХ ЗАХВОРЮВАНЬ ... 315
Шакер А.О.

РАЦІОНАЛЬНЕ КОНСТРУЮВАННЯ ГІБРИДНИХ ПОХІДНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛУ ТА ОРОТОВОЇ КИСЛОТИ ЯК ПЕРСПЕКТИВНИХ РЕГУЛЯТОРІВ РЕПАРАТИВНИХ ПРОЦЕСІВ ... 316
Карпенко Ю.В.

1,2,4-ТРИАЗОЛИ ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ ФАРМАКОФОРИ В МЕДИЧНІЙ ХІМІЇ ... 317
Федотов С. О.

СПРЯМОВАНИЙ ПОШУК ПРОТИЗАПАЛЬНИХ ЗАСОБІВ СЕРЕД НОВИХ ПОХІДНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНИХ КАРБОНОВИХ КИСЛОТ ... 318
Савченко К.Ю., Скорина Д.Ю.

IN SILICO ОЦІНКА ФАРМАКОКІНЕТИЧНОГО ПРОФІЛЮ ТА БІОЛОГІЧНОЇ БЕЗПЕКИ НОВИХ ПОХІДНИХ 4-ІДЕНАМІНО-5-(ХІНОЛІН-2-ІЛ)-3-ТІО-1,2,4-ТРІАЗОЛУ ... 319
Довбня Д. В., Каплаушенко А. Г.

SEARCH FOR NEW COUMARIN DERIVATIVES AS POTENTIAL ANTIDEPRESSANT AGENTS. ... 320
Shtyl Tetiana[1]

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
Skoryi M. P.

SYNTHESIS AND IN SILICO 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
Fedotov S. O.

АНАЛІТИЧНА, ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ, СТАНДАРТИЗАЦІЯ ЛЗ ... 323

РОЗРОБКА МЕТОДИКИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АНА-КИСЛОТ В ЗАСОБАХ ЛІКУВАЛЬНОЇ КОСМЕТИКИ ... 323
Бойків Т.Я.

РОЗРОБКА ТА СТВОРЕННЯ ЛЗ

АЛКІЛПОХІДНІ 7-((3-МЕРКАПТО-4-ЕТИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ-5-ІЛ)МЕТИЛ)-3-МЕТИЛКСАНТИНУ: *IN SILICO* ADME, ТОКСИКОЛОГІЧНИЙ ТА ДОКІНГ-СКРИНІНГ

Панасенко М. О., Британова Т. С.
Науковий керівник: д. фарм. н., доц. Гоцуля А. С.
Кафедра токсикологічної та неорганічної хімії
Запорізький державний медико-фармацевтичний університет

Гетероциклічні сполуки, зокрема похідні 1,2,4-триазолу та ксантину, залишаються перспективними об'єктами для створення нових біологічно активних речовин завдяки здатності формувати ефективні фармакофорні системи та взаємодіяти з різними біологічними мішенями. Поєднання цих структурних фрагментів в межах однієї молекули відкриває можливості для отримання сполук із широким спектром фармакологічної активності.

Мета дослідження. Комплексна *in silico* оцінка ADME-параметрів, токсикологічних характеристик та докінг-скринінг *S*-алкілпохідних 7-((3-меркапто-4-етил-1,2,4-триазол-5-іл)-метил)-3-метилксантину.

Матеріали та методи. ADME-аналіз проводили з використанням платформи SwissADME з оцінкою критеріїв лікоподібності (Lipinski, Ghose, Veber, Egan, Muegge), ліпофільності, молекулярної рефракції та TPSA. Прогноз гострої токсичності здійснювали за допомогою програми TEST. Молекулярний докінг виконували із застосуванням AutoDock Vina. Побудову лігандів проводили в MarvinSketch 6.3.0, HyperChem 8 та AutoDock Tools 1.5.6, підготовку білків - у Discovery Studio 4.0 та AutoDock Tools 1.5.6.

Результати. ADME-аналіз показав, що більшість досліджених сполук відповідає основним критеріям лікоподібності та характеризується оптимальними значеннями молекулярної рефракції і TPSA. Встановлено сприятливий рівень ліпофільності та високу ймовірність шлунково-кишкової абсорбції при обмеженій трансдермальній проникності.

Прогнозовані *in silico* показники гострої токсичності свідчать про ймовірну належність досліджених сполук до IV класу токсичності, що дозволяє попередньо розглядати їх як малотоксичні. Водночас прогнозована ймовірність прояву мутагенних властивостей вимагає обережності та необхідності подальших експериментальних досліджень.

Докінг-аналіз показав здатність сполук утворювати стабільні комплекси з активними центрами біомішеней за рахунок водневих, гідрофобних та π-взаємодій. Найбільш виражений прогнозований афінітет встановлено щодо ланостерол 14α-деметилази, що вказує на потенційні протигрибкові властивості. Менш виражену, але помітну спорідненість виявлено до рецепторної тирозинкінази анапластичної лімфоми. Варіація довжини *S*-алкільного замісника впливає на енергію зв'язування та просторову організацію комплексів.

Висновки. Комплексне *in silico* дослідження (ADME, токсичність, молекулярний докінг) підтвердило перспективність *S*-алкілпохідних 7-((3-меркапто-4-етил-1,2,4-триазол-5-іл)метил)-3-метилксантину як потенційно біологічно активних сполук. Встановлено їх сприятливий фармакокінетичний профіль, низький рівень гострої токсичності та здатність до ефективної взаємодії з біомішенями, що обґрунтовує доцільність подальших експериментальних досліджень.