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.

ВИЯВЛЕННЯ ПЕРСПЕКТИВНИХ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ СПОЛУК У РЯДУ 2-((4-((4-БРОМБЕНЗИЛ)АМІНО)-5-(ПІРИДИН-2-ІЛ)-4*H*-1,2,4-ТРІАЗОЛ-3-ІЛ)ТІО)-1-R-ЕТАНОНІВ

Ель Хамді Нур ЕльХуда
Науковий керівник: д. фарм. н., доц. Сафонов А.
Кафедра токсикологічної та неорганічної хімії
Запорізький державний медико-фармацевтичний університет

Метою роботи є здійснення комплексного in silico скринінгу та прогностичного моделювання фармакокінетичних параметрів, токсикологічного профілю та біологічної афінності нової серії 2-((4-((4-бромбензил)аміно)-5-(піридин-2-іл)-4*H*-1,2,4-тріазол-3-іл)тіо)-1-R-етанону для ідентифікації найбільш перспективних «сполук-лідерів» як потенційних антагоністів H_1-гістамінових рецепторів.

Матеріали і методи. Об'єктом дослідження стала серія з 10 нових сполук – похідних 2-((4-((4-бромбензил)аміно)-5-(піридин-2-іл)-4*H*-1,2,4-тріазол-3-іл)тіо)-1-R-етанону. Оцінка лікоподібності (drug-likeness) та фармакокінетичного профілю проводилася за допомогою веб-сервісу SwissADME (Swiss Institute of Bioinformatics). Розрахунок токсикометричних показників здійснювався за допомогою програмного забезпечення T.E.S.T. (Toxicity Estimation Software Tool, версія 5.1.2), розробленого Агентством з охорони навколишнього середовища США (US EPA). Для мінімізації похибок використовувався консенсусний метод, що об'єднує результати декількох математичних моделей (QSAR). Досліджувалися такі параметри: Гостра пероральна токсичність (LD_{50} для щурів (Rat)); Іхтіотоксичність (напівлетальна концентрація (LC_{50}) для товстоголової меноу (Fathead minnow) при експозиції 96 годин; Екотоксичність (фактор біоконцентрації (BCF) та мутагенність (тест Еймса))

Для вивчення спорідненості сполук до біологічних мішеней застосовувався метод жорсткого та гнучкого молекулярного докінгу. Мішень: Кристалічна структура H_1-гістамінового рецептора людини, отримана з бази даних Protein Data Bank (PDB) за кодом 3RZE. Як препарат порівняння використовувався дезлоратадин. Оцінка результатів здійснювалася за значенням вільної енергії зв'язування (Binding Affinity, ккал/моль).

Отримані результати. Здійснено теоретичний аналіз фармакокінетичних параметрів сполук 1–10 за допомогою сервісу SwissADME. Встановлено, що всі досліджувані структури характеризуються високим рівнем абсорбції у шлунково-кишковому тракті та не здатні долати гематоенцефалічний бар'єр, що мінімізує ризик небажаного впливу на ЦНС. Показники топологічної полярної поверхні (TPSA<116,46 AA^2) та консенсусного значення ліпофільності (log P ≈ 4,1-4,7) підтверджують відповідність більшості сполук критеріям «лікоподібності» за правилами Ліпінського та Вебера. На основі прогностичного моделювання в програмі T.E.S.T. оцінено екотоксикологічний профіль та гостру токсичність синтезованих речовин. Встановлено, що сполуки мають низький потенціал біоконцентрації (BCF < 42,05) та належать до IV класу токсичності при пероральному введенні (LD_{50} у межах 806,59–1731,23 мг/кг), що класифікує їх як малотоксичні речовини. Аналіз генотоксичності показав, що толільні (7-9) та хлорзаміщені (10) аналоги є мутагенно негативними, тоді як дифторзаміщення (5, 6) призводить до зростання ризику мутагенності та підвищення іхтіотоксичності.

За результатами молекулярного докінгу до H_1-гістамінового рецептора (PDB ID: 3RZE) доведено високу афінність усіх сполук 1–10 (енергія зв'язування від -7,79 до -8,42 ккал/моль), що суттєво перевищує показник препарату порівняння дезлоратадину (-6,88 ккал/моль).

Висновки. Найбільш перспективною сполукою-лідером визначено сполуку 8 (2-((4-((4-bromobenzyl)amino)-5-(pyridin-2-yl)-4H-1,2,4-triazol-3-yl)thio)-1-(m-tolyl)ethan-1-one), яка поєднує максимальну спорідненість до рецептора з оптимальними показниками безпеки та сприятливим ADME-профілем. Отримані дані є теоретичним обґрунтуванням для подальшого поглибленого вивчення даної серії як потенційних антигістамінних засобів.