

Міністерство охорони здоров'я України
Національний фармацевтичний університет
ДНТ «Львівський національний медичний університет імені Короля Данила»
Українське товариство медичної хімії

Міжнародна наукова конференція

Modern chemistry of medicines

15-17 жовтня 2026 р.
м. Харків, м. Львів, Україна

Посвідчення Державної наукової установи «Український інститут науково-технічної експертизи та інформації» № 828 від 17.11.2025 р.

МУЛЬТИТАРГЕТНЕ ПРОФІЛЮВАННЯ *N*-ПОХІДНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛУ ЩОДО МІШЕНЕЙ ЗАГОЄННЯ РАН

Юрій Карпенко[1*]

[1]*Запорізький державний медико-фармацевтичний університет, Запоріжжя, Україна*

Вступ. Похідні 1,2,4-триазолу є перспективним класом гетероциклічних сполук для створення нових біологічно активних речовин завдяки можливості широкої структурної модифікації, поєднання з іншими фармакофорними фрагментами та формування поліфункціональних молекул. Особливий інтерес становлять гібридні структури 1,2,4-триазолу та піримідинових фрагментів, зокрема похідних оротової кислоти. Їх застосування у розробці ранозагоювальних засобів є перспективним, оскільки репарація тканин включає взаємопов'язані процеси гемостазу, запалення, ангіогенезу, ремоделювання позаклітинного матриксу та потребує комплексного впливу на декілька молекулярних мішеней.
Матеріали та методи. Дослідження включало дизайн, синтез і комплексну оцінку похідних 1,2,4-триазолу та їх гібридів із піримідиновими структурами. Для прогнозування фізико-хімічних, фармакокінетичних і токсикологічних властивостей застосовували SwissADME, ADMETLab та інші in silico підходи. Молекулярний докінг проводили щодо білків, асоційованих із ключовими процесами загоєння ран, зокрема тромбіну, 5-ліпоксигенази, VEGFR-2, MMP-2 та MMP-9. Для пріоритетних структур виконували експериментальне визначення ферментативної активності, оцінку гострої токсичності на лабораторних тваринах і *Danio rerio*, моделювання проникнення через ліпідний бар'єр шкіри, а також дослідження ранозагоювальної активності у складі електроспінених полімерних покриттів.
Результати та обговорення. Комплексний скринінг показав, що структурна модифікація 1,2,4-триазольного фрагмента істотно впливає на ліпофільність, розчинність, прогнозовану проникність і характер взаємодії з білковими мішенями. Для окремих серій встановлено виражені мультитаргетні профілі щодо білків, залучених до запальної, проліферативної та ремоделювальної фаз ранового процесу. Для інших представників гібридного ряду виявлено перспективні профілі взаємодії з матриксними металопротеїназами. Моделювання проникнення через модельний ліпідний бар'єр продемонструвало суттєві відмінності між сполуками за здатністю до розподілу в мембрані та подолання енергетичного бар'єра. У дослідах *in vivo* електроспінені покриття на основі полівінілпіролідону, що містили пріоритетні сполуки, прискорювали скорочення площі експериментальної рани порівняно з полімерним покриттям без активної речовини; для найбільш активного зразка зменшення площі рани на 8 добу досягало 89,0% порівняно з 70,5% у групі носія. Сукупність результатів підтвердила доцільність послідовної інтеграції хімічного дизайну, молекулярного моделювання, токсикологічного скринінгу та експериментальної фармакології.
Висновки. Похідні 1,2,4-триазолу та їх гібриди з піримідиновими структурами є перспективною платформою для створення мультитаргетних ранозагоювальних засобів.

Список літератури

1. Karpenko Y, Parchenko V, Panasenko O, Bihdan O, Pukhalska I, Nikiforov O, Nahorna N, Nahornyi V, Roik O. Novel 1,2,4-triazole-thiopyrimidine hybrids as COX-2 inhibitors: synthesis, ADME profiling, antioxidant activity, and molecular docking. *BioMed Research International*. 2026;2026:4477854. doi:10.1155/bmri/4477854. karpenko_farm_ua
2. Karpenko Y, Parchenko V, Kucherenko L, Chetvertak T, Bihdan O, Pukhalska I, Roik O, Safronova D, Meladze I, Bushueva I. Orotic acid–1,2,4-triazole hybrids as potential MMP-2,9 modulating wound-healing agents: synthesis, molecular docking and biological evaluation. *Scientia Pharmaceutica*. 2026;94(3):65. doi:10.3390/scipharm94030065.

Розроблення складу та технології косметичної сироватки для волосся з екстрактом *Bacopa monnieri* **153**
Ліана Калиман, Ольга Нікітіна

МУЛЬТИТАРГЕТНЕ ПРОФІЛЮВАННЯ *N*-ПОХІДНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛУ ЩОДО МІШЕНЕЙ ЗАГОЄННЯ РАН **154**
Юрій Карпенко

***In silico* скринінг біоактивних пептидів рослинного походження як перспективних антидіабетичних агентів** **155**
Марія Кирилів, Ірина Бекус, Григорій Загричук

Вплив pH на хімічну стабільність лікарських речовин у водних розчинах **156**
Микола Кіщук, Іванчук Ірина

ПЕРСПЕКТИВИ ІНКАПСУЛЯЦІЇ НАНОЧАСТИНОК ПОДВІЙНОГО ОКСИДУ ЗАЛІЗА В БІОПОЛІМЕРНУ МАТРИЦЮ ДЛЯ БІОМЕДИЧНОГО ЗАСТОСУВАННЯ **157**
Алла Коваль, Ірина Цихановська

Трансформація методології оцінювання у хімічній підготовці фармацевтів в епоху генеративного штучного інтелекту **158**
Марія Коваль, Людмила Іванець

Гістохімічні методи дослідження лікарських рослин **159**
Надія Ковальська, Уляна Карпюк, Лариса Махиня, Яцек Ліпок, Ізабела Ясіцька-Місяк

Аналіз монографій на субстанцію та лікарські форми цефтріаксону в провідних фармакопеях світу **160**
Єлизавета Ковальчук

Розроблення складу та технології зубної пасти з наногідроксиапатитом і кальцію карбонатом **161**
Валерія Кононенко, Юлія Закревська, Аліна Петриченко, Ілля Ресницький

***In silico* оцінка фармакокінетичних, токсикологічних властивостей і потенційної біологічної активності похідних *N*-(2,2,2-трихлор-1-(морфолін-4-карботіоамідо)етил)карбоксамідів** **162**
Олена Коркодола, Павло Задорожній

Пошук потенційних антигіпоксантів серед нових 7,8-дизаміщених 1,3-диметилксантину **163**
Дмитро Коробко

Розробка методики спектрофотометричного визначення зопіклону за реакцією з бромкрезоловим зеленим **164**
Василь Коробчук, Марія Михалків, Ірина Івануса, Григорій Загричук

Технологічні підходи до розроблення маски для догляду за пошкодженим волоссям з кондиціонуючими та захисними властивостями **165**
Анастасія Космідайло, Марія Удовенко, Ганна Тарасенко

ХІМІЧНИЙ ДИЗАЙН ТА SAR-АНАЛІЗ У СТВОРЕННІ АНТИДЕПРЕСАНТІВ **166**
Вікторія Котова, Надія Карман

Застосування фенольних сполук у Drug Design: біоізостеричні стратегії та мультитаргетна модуляція **167**
Вікторія Котова, Софія Руда