

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ І. Я. ГОРБАЧЕВСЬКОГО**



**НАУКОВО-ТЕХНІЧНИЙ ПРОГРЕС І ОПТИМІЗАЦІЯ
ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ СТВОРЕННЯ
ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТІВ**

**МАТЕРІАЛИ VIII НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ
З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ
*23–24 вересня 2020 р.***

Тернопіль
ТНМУ
«Укрмедкнига»
2020

УДК 615.1

Редакційна колегія:

проф. Кліщ І.М., проф. Грошовий Т.А., проф. Фіра Л.С., доц. Вронська Л.В.,
доц. Демчук М.Б., доц. Чубка М.Б., ас. Стечишин І.П. ас. Дуб А.І.,
ас. Павлюк Б.В.

Науково-технічний прогрес і оптимізація технологічних процесів
створення лікарських препаратів : матеріали VII наук.-практ. конф. з міжнар.
участю (Тернопіль, 23-24 вересня 2020 р.). – Тернопіль : ТНМУ, 2020. – 320 с.

*Усі матеріали збірника подаються в авторській редакції. Відповідальність
за представлені результати досліджень несуть автори тез.*

Висновки. Проведено гнучкий молекулярний докінгу та співставлено енергію зв'язування 5-ариліденпохідних-2-гетерил-тіазолін-4(5H)-онів з кіназою GSK-3 α/β . Опрацювання одержаних результатів дало змогу окреслити напрямки наступної модифікації сполук даного ряду з метою отримання більш активних речовин з протипухлинною дією.

ВИЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГІЙ ЗВ'ЯЗКІВ ДЛЯ ІНТЕРПРЕТАЦІЇ МАС-СПЕКТРИЧНОГО РОЗПАДУ РЯДУ 1,2,4 - ТРІАЗОЛ - 3 - ТІОНІВ, ВИХІДНИХ РЕЧОВИН ПРИ СИНТЕЗІ АКТИВНИХ ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ІНГРЕДІЄНТІВ

Д.Л. Усенко, Б.О. Варинський
Запорізький державний медичний університет
usenko.d.l@ukr.net

Метою роботи пояснити мас-спектрометричний розпад на підставі розрахунку енергій зв'язків 1,2,4-тріазол-3-тіонів, вихідних речовин при синтезі солей 1,2,4-тріазолілтіооцтових кислот - субстанцій потенційних лікарських засобів.

Матеріали і методи. Система Agilent 1260 Infinity HPLC. Для дослідження було використано одноквадрупольний мас-спектрометричний детектор Agilent 6120. Керування приладом та отримання результатів виконано за допомогою OpenLAB CDS. Розрахунки енергій зв'язків виконано за допомогою програмного забезпечення ChemBioOffice 2012.

Результати і обговорення. В випадку 4-(2-метоксифеніл)-5-(піридин-4-іл)-2,4-дигідро-3H-1,2,4-тріазол-3-тіону на підставі аналізу результатів розрахунку по методу MM2 енергій зв'язку спостерігаємо, що найслабкішими є зв'язки метоксифенільного циклу, тому ми спостерігаємо їх руйнування при утворенні катіонів з m/z 275,1, 237,1. Для 5-(фуран-2-іл)-4-феніл-2,4-дигідро-3H-1,2,4-тріазол-3-тіону найслабкіші зв'язки спостерігаються в фурановому циклі, руйнування фуранового циклу здійснюється практично на всіх запропонованих послідовностях реакцій фрагментації. Відносно 5-(піридин-4-іл)-2,4-дигідро-3H-1,2,4-тріазол-3-тіону, розрахунки енергій зв'язків показують, що найслабкішим є зв'язок сульфуру із тріазоловим циклом. Утворення димерного іону підвищує міцність зв'язку сірки з карбоном. В цілому квазімолекулярний іон в цьому випадку спостерігається найбільш стійким і при 200 В напрузі на фрагменторі. Нами виявлені окремі закономірності щодо восьми 1,2,4-тріазолтіонів.

Висновки. Розрахунки енергій зв'язків пояснюють запропоновані шляхи фрагментації досліджуваних тіонів.