



**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**НАУКОВЕ ТОВАРИСТВО СТУДЕНТІВ, АСПРАНТІВ, ДОКТОРАНТІВ І  
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ**

**ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ  
ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ  
КОНФЕРЕНЦІЇ СТУДЕНТІВ ТА МОЛОДИХ ВЧЕНИХ  
«ДОСЯГНЕННЯ СУЧАСНОЇ МЕДИЧНОЇ ТА  
ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ НАУКИ – 2022»**

**4 лютого 2022 року**



**ЗАПОРІЖЖЯ – 2022**

## **ОРГКОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ:**

### **ГОЛОВА ОРГКОМІТЕТУ:**

ректор ЗДМУ, Заслужений діяч науки і техніки України, проф. Колесник Ю.М.

### **ЗАСТУПНИКИ ГОЛОВИ:**

проректор з наукової роботи, Заслужений діяч науки і техніки України, проф. Туманський В.О.;

голова Координаційної ради з наукової роботи студентів, проф. Беленічев І.Ф.;

голова наукового товариства студентів, аспірантів, докторантів і молодих вчених, проф. Павлов С.В.;

секретар Координаційної ради з наукової роботи студентів, ст. викл. Абросімов Ю.Ю.;

голова студентської ради ЗДМУ Федоров А.І.

### **ЧЛЕНИ ОРГКОМІТЕТУ:**

заступник голови студентської ради Будагов Р.І.; голова навчально-наукового сектору студентської ради Єложенко І.Л.

## СИНТЕЗ, БУДОВА, МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДОКІНГ ТА БІОЛОГІЧНА АКТИВНІСТЬ НОВИХ ПОХІДНИХ БІС-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОЛІВ

Карпун Є. О.

Науковий керівник: проф. Парченко В. В.

Кафедра природничих дисциплін для іноземних студентів та токсикологічної хімії  
Запорізький державний медичний університет

В останній час велику увагу привертають дослідження гетероциклічних сполук, зокрема похідні 1,2,4-триазолу, що можуть бути використані у різних сферах. Багато 1,2,4-триазолвмісних циклів входять до складу фармацевтичних препаратів, включаючи антибактеріальні, противірусні, протипухлинні, протисудомні, протизапальні тощо.

**Метою дослідження** був синтез, встановлення будови, визначення параметрів молекулярної структури, дослідження біоактивності *in silico*, *in vitro* та *in vivo* нових похідних 4-алкіл-5-(((3-(піридин-4-іл)-1*H*-1,2,4-триазол-5-іл)тіо)метил)-4*H*-1,2,4-триазол-3-тіолу.

Було синтезовано понад 60 молекул різних класів: алкілпохідних, відповідних кислот, кетонів, амідів, естерів, спиртів. Нами вивчені фізико-хімічні характеристики та підтверджено структуру цих похідних за допомогою комплексних методів аналізу, включаючи  $^1\text{H}$  та  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектроскопію, ГХ-МС (молекулярна фрагментація) та елементний аналіз.

Комп'ютерний прогноз в ролі молекулярного докінгу та віртуального скринінгу демонструє доцільність пошуку інгібіторів різних ферментів, що відповідають за ноотропну, діуретичну, антиоксидантну та антимікробну дію.

Майже усі похідні біс-1,2,4-триазолу проявляли помірну або досить виражену бактерицидну дію проти десяти штамів мікроорганізмів. За результатами антимікробного скринінгу був розроблений патент на винахід. За результатами біологічних досліджень на антигіпоксичну дію встановлено, що 1-((4-етил-5-(((3-(піридин-4-іл)-1*H*-1,2,4-триазол-5-іл)тіо)метил)-4*H*-1,2,4-триазол-3-іл)тіо)пропан-2-он є сполукою, що перевищувала антигіпоксичну активність мексидолу на 1,0%. Результати визначення летальної концентрації ( $\text{LC}_{50}$ ) на *Danio rerio* показали, що досліджувані сполуки відносяться до класу малотоксичних сполук. Були проведені дослідження впливу S-похідного 1,2,4-триазолу з пентильним залишком на культивування мікобактерії *Bovis*. На жаль різні концентрації досліджуваної субстанції не впливають на характер росту колоній патогенних форм збудника туберкульозу.

Дані віртуального та фармакологічного скринінгу свідчать про перспективність пошуку біоактивних регуляторів серед наведених класів S-похідних біс-1,2,4-триазолів.