



Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра медичної хімії
Кафедра загальної хімії
Кафедра аналітичної хімії та аналітичної токсикології

Міжнародна internet-конференція

Modern chemistry of medicines

18 травня 2023 р.
м. Харків, Україна

Повідчення Державної наукової
установи «Український інститут
науково-технічної експертизи та
інформації» № 550 від 19.12.2022 року

Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра медичної хімії
Кафедра загальної хімії
Кафедра аналітичної хімії та аналітичної токсикології

Ministry of health of Ukraine
Ministry of education and science of Ukraine
National university of pharmacy
Pharmaceutical chemistry department
Medicinal chemistry department
General chemistry department
Analytical chemistry and analytical toxicology department

MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES

Матеріали
Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,
18 травня 2023 року

Materials
of the International Internet Conference 'Modern chemistry of medicines',
May 18, 2023

ХАРКІВ
KHARKIV
2023

УДК 615.3(06)

М 78

Електронне видання мережне

Редакційна колегія: проф. Котвіцька А. А., проф. Владимірова І. М., проф. Георгіянц В.А., проф. Перехода Л.О., проф. Журавель І.О., проф. Колісник С.В., доц. Криській О.С., проф. Власов С.В., ас. Смелова Н.М., ас. Григорів Г.В.

Конференція зареєстрована в УкрІНТЕІ (посвідчення № 550 від 19.12.2022 р.)

М78 **Modern** chemistry of medicines: матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (18 травня 2023 р., м. Харків) – Електрон. дані. – Х. : НФаУ, 2023. – 284 с. – Назва з тит. екрана.

Збірник містить матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (18 травня 2023 р., м. Харків) присвячені висвітленню сучасних тенденцій створення оригінальних АФІ синтетичного та рослинного походження, фармацевтичної розробки, забезпечення якості лікарських засобів.

Для широкого кола наукових та практичних фахівців у галузі фармації та медицини, магістрантів, аспірантів, докторантів, співробітників фармацевтичних підприємств, викладачів закладів вищої освіти.

Редколегія не завжди поділяє погляди авторів.

Автори опублікованих матеріалів несуть повну відповідальність за підбір, точність наведених фактів, цитат, економіко-статистичних даних, власних імен та інших відомостей.

Матеріали подаються мовою оригіналу.

УДК 615.3(06)

© НФаУ, 2023

ADME АНАЛІЗ ПОХІДНИХ 4-((R-ІДЕН)АМІНО)-3,5-ДИМЕТИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛУ

Британова Т. С., Гоцуля А. С.

*Запорізький державний медико-фармацевтичний університет,
Запоріжжя, Україна
goculyats@gmail.com*

Вступ. Ефективність ліків пов'язана з багатьма факторами. Один яких визначається здатністю молекули досягти своєї цілі в організмі людини в достатній концентрації та залишатися там у біологічно активній формі достатньо довго. Тому обов'язковий етап розробки ліків передбачає аналіз фармакокінетичних параметрів поглинання, розподілу, метаболізму та елімінації, в тому числі, на попередньому етапі формування загального дизайну досліджень. І тут в нагоді стають *in silico* методи, наприклад, веб-платформа SwissADME.

Мета. Обґрунтування перспективності створення біологічно активних сполук в ряду похідних 4-((R-іден)аміно)-3,5-диметил-1,2,4-триазолу.

Матеріали та методи. Розрахунок параметрів лікоподібності ADME здійснено з використанням online-ресурсу SwissADME. Як базову структуру було запропоновано 3,5-диметил-4-аміно-1,2,4-триазол з наступною функціоналізацією за участю арилальдегідів (бензальдегіда та його похідних). За допомогою ADMET аналізу врахована відповідність структур-кандидатів показникам лікоподібності.

Результати та їх обговорення. Значення Log S для досліджуваних структур були встановлені в діапазоні від – 2,81 до – 4,27, що вказує на досить вірогідну здатність розчинятись у воді. Прогнозовані значення LogP_{oct/w} знаходяться в межах від 1,29 до 2,29, що підкреслює той факт, що всі сполуки вписуються у критерії ліпофільності. Слід зазначити, що показники LogS і LogP_{oct/w} вказують на кореляцію між розчинністю та ліпофільністю. За показниками молекулярної маси (від 200,24 г/моль до 279,14 г/моль), топологічної площини полярної поверхні (від 43 до 88 Å²), молекулярної рефракції та гнучкості молекули більшість сполук відповідають необхідним критеріям. Кількість акцепторів Н-зв'язку (HBAs) становить 3-5, що вкладається в допустимий інтервал. Кількість донорів Н-зв'язку (HBDs): даний показник знаходився в межах 0-1, що так само є допустимим.

Слід зауважити, що сполуки мають ступінь насиченості молекул, а саме співвідношення sp³-гібридизованих атомів Карбону, лише 0,18 при необхідному мінімальному значенні 0,25. За критеріями біодоступності всі сполуки мають результати 0,55 од., що засвідчує вірогідну 10 % біодоступність при пероральному застосуванні.

За показниками фільтрів лікоподібності (Lipinski, Ghose, Veber, Egan та Muegge) більшість сполук відповідають заявленим критеріям.

Висновки. Одержані результати ADME-аналізу дозволили звузити віртуальний ряд похідних 4-((R-іден)аміно)-3,5-диметил-1,2,4-триазолу до 12 сполук-кандидатів для подальшого синтезу.