

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИКО-ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ**

МАТЕРІАЛИ

**ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО- ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ
«ЗАПОРІЗЬКИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ
ФОРУМ - 2023»**

23-24 листопада 2023 року

ПОШУК БАР З АНТИОКСИДАНТНИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ СЕРЕД ПОХІДНИХ 3,5-БІС(5-МЕРКАПТО-4-R-4H-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІЛ)ФЕНОЛУ

Ксенія Ісайчева¹, Андрій Каплаушенко² Юрій Самелюк³

^{1,2,3}Запорізький державний медико-фармацевтичний університет (Запоріжжя)
isaycheva.k.k@zsmu.edu.ua¹, kaplaushenko@ukr.net², sameluk_yurii@ukr.net³

Вступ. Сучасна практика в галузі медицини та фармації ґрунтується на інтенсивному використанні лікарських засобів синтетичного походження. У широкий спектр біологічно активних структур входять похідні гетероциклічних систем, таких як фуран, піррол, піразол, піридин, піримідин, пурин та інші. Особливу увагу приділяють структурам, які відзначаються низькими показниками токсичності та високими фармакологічними ефектами. Безумовно, вихідна гетероциклічна сполука повинна мати кілька реакційно активних центрів для створення максимально ефективних фармакофорів. Дослідження вчених [1, 2] та онлайн-прогнозування фармакологічної дії вказують на перспективність використання похідних гетероциклічної системи 1,2,4-тріазолу як моделей для нових активних фармацевтичних інгредієнтів.

Матеріали та методи. Виходячи до вимог Європейського союзу щодо гуманного відношення до лабораторних тварин за допомогою *in vitro* методики визначено антиоксидантну дію всіх синтезованих речовин (Дослідження антиоксидантної активності синтезованих сполук проведені *in vitro* за описаною методикою: «Research of antiradical activity»)

Результати і обговорення. В результаті ретельного аналізу наукових джерел та узагальнення інформації про методи синтезу, біологічні властивості похідних 1,2,4-тріазолу, а також використання результатів online прогнозування фармакологічної дії, виконані наступні завдання:

1. Згідно з комп'ютерним прогнозом різних видів біологічної дії, вдало визначено потенційно активні класи сполук похідних 3,5-біс(5-меркапто-4-R-4H-1,2,4-тріазол-3-іл)фенолу, зокрема, щодо їх антиоксидантної та антигіпоксичної дії.

2. Успішно здійснено синтез 3,5-біс(5-меркапто-4-R-4H-1,2,4-тріазол-3-іл)фенолів, як вихідних речовин для потенційних антиоксидантних та антигіпоксичних агентів. Розроблено препаративні методи отримання 2,2'-(((5-гідрокси-1,3-фенілен)біс(4-R-4H-1,2,4-тріазол-3,5-діл))біс(сульфандиіл))диацето(бензо)нітрилів, 2,2'-(((5-гідрокси-1,3-фенілен)біс(4-R-4H-1,2,4-тріазол-3,5-діл))біс(сульфандиіл))диацетатних (бензойних) кислот, їх солей, естерів та іміноестерів.

3. Підтверджено структуру та індивідуальність усіх синтезованих сполук за допомогою сучасних фізико-хімічних методів, зокрема елементного аналізу, ІЧ-спектрофотометрії, ¹H, ¹³C, ВЕРХ-МС, а також проведено додаткові трансформації.

4. Проведено *in vitro* дослідження антиоксидантної активності синтезованих сполук, визначено кількісну закономірність "будова – антиоксидантна дія" за допомогою QSAR-моделі. Для найактивнішої сполуки визначено показник гострої токсичності і антигіпоксичної дії.

Висновки. В результаті виконання завдань дослідження визначено потенційно активні класи сполук, успішно синтезовано та підтверджено структуру 3,5-біс(5-меркапто-4-R-4H-1,2,4-тріазол-3-іл)фенолів, проведено *in vitro* дослідження їхньої антиоксидантної активності, що вказує на перспективи їхнього фармакологічного застосування.

Література

1. SAMELIUK Y. et al. Prospects for the search for new biologically active compounds among the derivatives of the heterocyclic system of 1, 2, 4-triazole // Hacettepe University Journal of the Faculty of Pharmacy. – 2022. – Т. 42. – №. 3. – С. 175-186.

2. SAMELIUK Y., KAPLAUSHENKO T., AL ZEDAN F. 1, 2, 4-Triazole derivatives in medicine and pharmacy and application prospects // Journal of Faculty of Pharmacy of Ankara University. – 2021. – Т. 45. – №. 3. – С. 598-614.