

Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра загальної хімії
Українське товариство медичної хімії

Ministry of health of Ukraine
Ministry of education and science of Ukraine
National university of pharmacy
Pharmaceutical chemistry department
General chemistry department
Ukrainian Society of Medicinal Chemistry

MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES

Матеріали
Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,
7 листопада 2025 року

Materials
of the International Internet Conference ‘Modern chemistry of medicines’,
November 7, 2025

ХАРКІВ
KHARKIV
2025



***In silico* аналіз естерів 2-((4-((4-бромбензил)аміно)-5-(піридин-2-іл)-4H-1,2,4-триазол-3-іл)тіо)ацетатної кислоти**

Андрій Сафонов^{1*}, Євгенія Стащенко²

¹Запорізький державний медико-фармацевтичний університет, д. фарм. н., доцент кафедри токсикологічної та неорганічної хімії, Запоріжжя, Україна

²Запорізький державний медико-фармацевтичний університет, студентка 5-го курсу фармацевтичного факультету, Запоріжжя, Україна

8safonov@gmail.com

Вступ.

Сучасна фармакологія постійно стикається з викликом розробки нових, безпечних та ефективних антигістамінних препаратів для боротьби з алергічними реакціями. Незважаючи на наявність низки антигістамінних засобів, існує нагальна потреба в лігандах з покращеними фармакокінетичними та фармакодинамічними профілями, особливо з високою селективністю до людського H₁-гістамінового рецептора (PDB ID 3RZE). Представлене дослідження зосереджено на пошуку таких перспективних молекул серед серії нових естерів триазольного ряду, які можуть слугувати основою для майбутніх лікарських засобів.

Матеріали та методи.

Було досліджено 10 нових естерів 2-((4-((4-бромбензил)аміно)-5-(піридин-2-іл)-4H-1,2,4-триазол-3-іл)тіо)ацетатної кислоти за допомогою програм прогнозування токсикологічних показників (TEST), розрахунку фармакокінетичних та фармакодинамічних параметрів (ADMET) за допомогою SWISSADME, а також молекулярного докінгу до H₁-рецептора (PDB ID 3RZE).

Результати та обговорення.

Реалізовано аналіз фармакокінетичних та фармакодинамічних параметрів досліджуваних сполук за допомогою комп'ютерного інструменту SWISSADME, який виявив сприятливі характеристики. Ці позитивні результати свідчать про те, що естери є перспективними кандидатами для подальшого поглибленого вивчення їхньої біологічної активності та безпеки.

Токсикологічний аналіз показав, що всі сполуки є немутагенними та належать до малотоксичного класу (LD₅₀ на високих рівнях), підтверджуючи їхній сприятливий профіль безпеки. Докінг-аналіз встановив, що більшість естерів мають афінність, кращу або співмірну з еталонним дезлоратадином.

Реалізовано молекулярний докінг аналіз до H₁ гістамінового рецептора, здійсненим програмним інструментом SWISSADME. Сполука **6** (ізобутил 2-((4-((4-бромбензил)аміно)-5-(піридин-2-іл)-4H-1,2,4-триазол-3-іл)тіо)ацетат). демонструє найвищу афінність до H₁-рецептора, перевершуючи еталонний дезлоратадин. Хоча її розчинність є нижчою, ніж у коротших аналогів, вона має прийнятну гостру токсичність і, що важливо, не інгібує CYP1A2 та CYP2D6. Враховуючи її високу прогнозовану активність, вона є головним кандидатом для подальших досліджень. Хоча і інші кандидати за показниками безпечності є перспективними для подальшого синтезу і дослідження.

Висновки.

На основі інтегрованого аналізу активності, токсичності та ADMET-профілів, для подальшого синтезу та *in vitro* і *in vivo* дослідження було обрано три найбільш перспективні сполуки

Список літератури

1. SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules [Internet]. Lausanne: Swiss Institute of Bioinformatics; c2024 [cited 2024 Oct 28]. Available from: <https://www.swissadme.ch>
2. US EPA. Toxicity Estimation Software Tool (TEST) [Software]. Version 5.12. Washington (DC): U.S. Environmental Protection Agency; 2022 [cited 2024 Oct 28]. Available from: <https://www.epa.gov/chemical-research/toxicity-estimation-software-tool-test>



Розробка нановолокнистих композицій із вмістом рослинних екстрактів як потенційних кровоспинних матеріалів	154
Марія Розумненко, Анастасія Бегдай, Вікторія Лижнюк, Олена Іщенко, Володимир Бессарабов	
Аналіз сучасних методів контролю якості етилметилгідроксипіридину сукцинату в лікарських засобах.....	155
Леся Роман, Ольга Криванич	
Аналіз випадків отруєння та токсичних проявів при передозуванні фексофенадином	156
Світлана Романова, Марія Михалків, Ірина Івануса	
<i>In silico</i> аналіз естерів 2-((4-((4-бромбензил)аміно)-5-(піридин-2-іл)-4H-1,2,4-триазол-3-іл)тіо)ацетатної кислоти	157
Андрій Сафонов, Євгенія Стащенко	
Аналіз амінокислотного складу <i>Ruta graveolens</i> L. українського походження	158
Тетяна Сергієнко, Вікторія Георгіянц, Марія Скибіцька, Ольга Михайленко	
Порівняльні дослідження антиоксидантних властивостей гесперидину та його твердої дисперсної системи	159
Ольга Сив'юк, Марія Розумненко, Владислав Удовиський, Вікторія Лижнюк, Вадим Лісовий, Володимир Бессарабов	
Ідентифікація цеlexоксиду класичними хімічними методами для вхідного контролю в умовах аптеки	160
Дар'я Скаковська	
Хімічне обґрунтування стреспротективної активності комбінації натрію сукцинату і диметиламіноетанолу	161
Владислав Слободяник, Людмила Кучеренко	
Пилік як об'єкт токсикологічного аналізу	162
Катерина Сметаніна	
Ідентифікація дубильних речовин у листі Барбарису Тунберга «Red Pillar»	163
Галина Смойловська, Олена Малюгіна, Олена Єренко, Тая Хортецька	
Аналіз випадків отруєння левоцетиризином та його побічних реакцій на організм людини	164
Катерина Стаховська, Марія Михалків, Ірина Івануса, Яна Яцюк	
Підбір умов для одночасного визначення ібупрофену, кофеїну та допоміжних речовин методом ВЕРХ у комбінованому оральному лікарському засобі	165
Іван Суржиков, Василь Чорний, Володимир Міщенко, Вікторія Георгіянц	
Медична хімія канабіноїдів: фармакокінетичні аспекти взаємодії з лікарськими засобами	166
Ірина Сусяк, Вікторія Георгіянц	
Розробка композиції рідкого антисептичного засобу для гігієни рук	168
Ганна Тарасенко, Богдан Муравський	
Пребіотичний крем для відновлення мікробіомного балансу шкіри	169
Анна Рибич, Ганна Тарасенко	