



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

# **ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ**

**ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ  
КОНФЕРЕНЦІЇ З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ**

## **«Запорізький фармацевтичний форум – 2025:**

***Фармація майбутнього –  
від сучасного стану до глобальних викликів»***

***20–21 листопада 2025 р.***



***Запоріжжя  
2025***

## ГІБРИДНІ ПОХІДНІ 3-МЕТИЛКСАНТИНУ ТА 1,2,4-ТРИАЗОЛУ: СИНТЕЗ ТА ФАРМАКОЛОГІЧНИЙ ПРОГНОЗ

А. Гоцуля

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет (Запоріжжя, Україна)  
hotsulia.a.s@zsmu.edu.ua

Будова азагетероциклічних сполук відкриває широкі можливості для створення різноманітних похідних із високим потенціалом біологічної активності. Представники даної групи речовин є зручними об'єктами для проведення різноманітних хімічних перетворень та модифікацій, що дозволяє цілеспрямовано формувати необхідні властивості кінцевих продуктів.

**Метою** дослідження була оптимізація методів синтезу та оцінка біологічного потенціалу похідних 1,2,4-триазолу, які містять синтон 3-метилксантину, з перспективою подальшого використання цих сполук як основи для створення нових біологічно активних речовин.

**Матеріали та методи.** Як вихідну сполуку було використано 3-метилксантин, який послідовно піддавали каскаду хімічних перетворень. На першому етапі синтезовано (3-метилксантин-7'-іл)етилетаноат, який далі перетворювали на відповідний гідразид. Наступним кроком було одержання 2-(2-(3'-метилксантин-7'-іл)ацетил)-N-метилгідрaziнокарботіоаміду, що після лужної гетероциклізації дало змогу сформуванню 1,2,4-триазолового кільця. Одержаний 7'-((3-меркапто-4-метил-1,2,4-триазол-5-іл)метил)-3'-метилксантин був використаний у реакції S-алкілювання хлорацетамідами, що дозволило одержати ряд нових похідних із потенційною біологічною активністю. Будову синтезованих сполук підтверджено методами елементного аналізу та  $^1\text{H}$  ЯМР-спектроскопії, а їх індивідуальність - за допомогою хромато-мас-спектрометрії.

Подальші дослідження були спрямовані на оцінку біологічного потенціалу методами *in silico*. Прогнозування показників гострої токсичності та мутагенності здійснювали з використанням програми TEST. Для поглибленого аналізу молекулярних механізмів взаємодії застосовано молекулярний докінг із використанням програмних засобів AutoDock 4.2.6, Open Babel 3.1.1, MGL Tools-1.5.6 та BIOVIA Discovery Studio. Додатково фармакокінетичні параметри, дескриптори та критерії «лікоподібності» оцінювали за допомогою онлайн-платформи SwissADME.

**Результати та їх обговорення.** Проведене *in silico* моделювання предиктивно ідентифікує приналежність досліджених структур до малотоксичних з низьку ймовірність прояву мутагенних властивостей. За результатами молекулярного докінгу встановлено, що найвищу спорідненість синтезовані ліганди проявляють до активних центрів циклооксигенази-2 та ланостерол 14 $\alpha$ -деметилази, що вказує на їх потенційну протизапальну та протигрибкову дію. Крім того, отримані сполуки продемонстрували сприятливий фармакокінетичний профіль і відповідність основним критеріям «лікоподібності», що підтверджує перспективність подальшого експериментального дослідження їхньої біологічної активності.

**Висновки.** Встановлено оптимальні умови та успішно здійснено синтез 2-((5-((3'-метилксантин-7'-іл)метил)-4-метил-1,2,4-триазол-3-іл)тіо)-N-арилацетамідів. Результати молекулярного моделювання та ADME-аналізу підтвердили доцільність подальшого вивчення цього класу сполук як перспективних кандидатів на створення біологічно активних речовин із потенційною протизапальною та протигрибковою дією.

|                                                                                                                                                                                            |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| ОПТИМІЗАЦІЯ СКЛАДІВ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ: ФІЗИЧНО-ОБҐРУНТОВАНІ НЕЙРОННІ МЕРЕЖІ ТА БАЙЄСІВСЬКИЙ ПІДХІД.....                                                                                   | 19 |
| <i>Б. Бурлака</i>                                                                                                                                                                          |    |
| ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМБІНОВАНИХ ПРОТИЗАПАЛЬНИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ НА ОСНОВІ НІМЕСУЛІДУ .....                                                                                       | 20 |
| <i>В. Василенко, С. Соловійов, Є. Василенко</i>                                                                                                                                            |    |
| ЗАСТОСУВАННЯ ДІАЗОЛЮ ЧЕРВОНОГО 2Ж ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ МЕЛОКСИКАМУ .....                                                                                                                         | 21 |
| <i>С. Васюк, А. Коржова</i>                                                                                                                                                                |    |
| ФАРМАКОЕКОНОМІЧНИЙ АНАЛІЗ УКРАЇНСЬКОГО РИНКУ АПТЕЧКИ МЕДИЧНОЇ ЗАГАЛЬНОЇСЬКОВОЇ ІНДИВІДУАЛЬНОЇ.....                                                                                         | 22 |
| <i>А. Ващук, Т. Волошенюк, Т. Бойко</i>                                                                                                                                                    |    |
| ФАРМАКОТЕРАПЕВТИЧНИЙ АНАЛІЗ ЗАСТОСУВАННЯ БЕЗРЕЦЕПТУРНИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ ПРИ СИМПТОМАТИЧНОМУ ЛІКУВАННІ СТРЕСУ .....                                                                      | 23 |
| <i>Т. Волевач, Т. Волошенюк, М. Півнюк</i>                                                                                                                                                 |    |
| QSAR АНАЛІЗ ВПЛИВУ БУДОВИ АМОНІЄВИХ ГЕКСАФТОРОСИЛКАТІВ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ЇХ АНТИКАРІЄСНОЇ АКТИВНОСТІ.....                                                                                  | 24 |
| <i>В. Гельмбольдт, Л. Огніченко, Т. Сідельникова, І. Шишкін, В. Кузьмін</i>                                                                                                                |    |
| ПОРІВНЯННЯ МОРФОЛОГІЧНИХ ОЗНАК ВИРОБНИЧИХ ЗРАЗКІВ <i>DACI CAROTAE FRUCTUS</i> .....                                                                                                        | 25 |
| <i>Л. Глущенко, Н. Приведенюк, В. Мінарченко</i>                                                                                                                                           |    |
| ПОРІВНЯННЯ СКЛАДУ АДСОРБЦІЙНИХ МАЗЕВИХ ОСНОВ ВІТЧИЗНЯНОГО ТА ІНОЗЕМНОГО ВИРОБНИЦТВА .....                                                                                                  | 26 |
| <i>Д. Голядинець, М. Федоровська</i>                                                                                                                                                       |    |
| ЗАСТОСУВАННЯ ПРИНЦИПІВ ANALYTICAL QUALITY BY DESIGN ДЛЯ РОЗРОБКИ ВЕРХ – МЕТОДИКИ ОДНОЧАСНОГО КІЛЬКІСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ БЕНЗИДАМІНУ, ЛІДОКАЇНУ ТА МЕТИЛПАРАБЕНУ В КОМБІНОВАНОМУ ПРЕПАРАТІ..... | 27 |
| <i>О. Гончар, В. Чорний, О. Головченко, В. Георгіяни</i>                                                                                                                                   |    |
| ГІБРИДНІ ПОХІДНІ 3-МЕТИЛКСАНТИНУ ТА 1,2,4-ТРИАЗОЛУ: СИНТЕЗ ТА ФАРМАКОЛОГІЧНИЙ ПРОГНОЗ .....                                                                                                | 28 |
| <i>А. Гоцуля</i>                                                                                                                                                                           |    |
| ВИВЧЕННЯ ВМІСТУ ФЕНОЛЬНИХ СПЛУК У ЕКСТРАКТІ ШИШКОЯГІД ЯЛІВЦЮ ЗВИЧАЙНОГО .....                                                                                                              | 29 |
| <i>А. Григоренко, Р. Конечна</i>                                                                                                                                                           |    |
| СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО ЕКОНОМІЧНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ СТВОРЕННЯ, ВИГОТОВЛЕННЯ ТА ДИСТРИБУЦІЇ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ .....                                                                                 | 30 |
| <i>А. Грицик, С. Феденько, В. Феденько</i>                                                                                                                                                 |    |
| АНАЛІЗ РЕАЛІЗАЦІЇ ПРОГРАМИ «ДОСТУПНІ ЛІКИ» В ПЕРЕГІНСЬКІЙ ГРОМАДІ ІВАНО-ФРАНКІВСЬКОЇ ОБЛАСТІ .....                                                                                         | 31 |
| <i>О. Гулій, І. Чухрай</i>                                                                                                                                                                 |    |
| БЕЗПЕРЕРВНИЙ ПРОФЕСІЙНИЙ РОЗВИТОК В ФАРМАЦІЇ. ПРОБЛЕМИ ТА ВИКЛИКИ .....                                                                                                                    | 32 |
| <i>Л. Давтян, В. Тодорова</i>                                                                                                                                                              |    |
| ВПЛИВ НАСТОЙКИ З ЛИЧИНОК МОЛІ ВОСКОВОЇ НА ПОКАЗНИКИ АНТИОКСИДАНТНОЇ СИСТЕМИ ЩУРІВ З МОДЕЛЬОВАНИМ ТОКСИЧНИМ ГЕПАТИТОМ .....                                                                 | 35 |
| <i>Б.-Д. Данилюк, Л. Фіра</i>                                                                                                                                                              |    |
| АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД МЕТОДІВ ВИЗНАЧЕННЯ ФЛАВОНОЇДІВ У ДІЄТИЧНИХ ДОБАВКАХ НА ОСНОВІ <i>GINKGO BILOBA</i> .....                                                                                 | 36 |
| <i>Г. Данчук, І. Івануса, М. Михалків, О. Ковальська</i>                                                                                                                                   |    |
| ОЦІНКА ІНДИКАТОРІВ ЯКОСТІ МЕДИЧНОЇ ДОПОМОГИ: ДОСВІД ХЕРСОНСЬКОЇ МІСЬКОЇ КЛІНІЧНОЇ ЛІКАРНІ ІМ. Є.Є. КАРАБЕЛЄША .....                                                                        | 37 |
| <i>В. Данько</i>                                                                                                                                                                           |    |