



**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***

IN SILICO АНАЛІЗ ТОКСИЧНОСТІ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ 3-(АЛКІЛТІО)-N-(4-ФТОРБЕНЗИЛ)-5-(ТІОФЕН-2-ІЛМЕТИЛ)-4Н-1,2,4-ТРІАЗОЛ-4-АМІНІВ

А. Сафонов¹, В. Шульга²

^{1,2}Запорізький державний медико-фармацевтичний університет
(Запоріжжя, Україна)
8safonov@gmail.com¹

Вступ. Сучасна фармакологія прагне створити нові, безпечні та високоефективні антигістамінні препарати для лікування алергії. Незважаючи на значний арсенал існуючих засобів, існує гостра потреба в розробці лігандів з покращеними фармакокінетичними та фармакодинамічними профілями. Ключовим завданням є досягнення високої селективності до людського H₁-гістамінового рецептора (PDB ID 3RZE).

Основна Мета роботи - виявити перспективні молекули серед нової серії алкілів тріазольного ряду, які можуть стати основою для майбутніх протиалергічних лікарських засобів.

Матеріали та методи. Було досліджено десять нових 3-(алкілтіо)-N-(4-фторбензил)-5-(тіофен-2-ілметил)-4Н-1,2,4-тріазол-4-амінів із використанням програм для прогнозування токсикологічних параметрів (TEST), оцінювання фармакокінетичних і фармакодинамічних характеристик (ADMET) у середовищі SWISSADME, а також проведено молекулярний докінг до H₁-рецептора (PDB ID: 3RZE).

Результати та обговорення. За допомогою QSAR-моделі TEST було проведено прогноз токсикологічних властивостей серії N-(4-фторбензил)-3-(алкілтіо)-5-(тіофен-2-ілметил)-4Н-1,2,4-тріазол-4-амінів. Високі розраховані значення LD₅₀ свідчать про низьку гостру токсичність досліджуваних сполук, що формує сприятливий початковий профіль їхньої безпеки та підтверджує перспективність подальших досліджень. Молекулярний докінг, виконаний у SwissADME методом *Docking with attracting cavities*, дав змогу оцінити взаємодію сполук із фармакологічно значущою мішенню — H₁-гістаміновим рецептором.

За енергіями зв'язування найбільш активними визначено сполуку з найдовшим алкілним ланцюгом (щодо H₁-рецептора). Аналіз залежності «структура–властивості» продемонстрував, що найбільш перспективними для створення системних лікарських засобів є представники з короткими алкілними замісниками (С3 та С4; пропіл- та ізопропілтіо). Ці речовини характеризуються оптимальним поєднанням сприятливих ADME-параметрів (відповідність Правилу п'яти, добра розчинність і прогнозована висока абсорбція) та вираженого біологічного потенціалу (висока афінність до H₁).

Сполуки з довгими алкілними ланцюгами (С8–С10), характеризуються відсутністю прогнозованої мутагенності та найвищою афінністю до H₁-рецептора, однак їх низька розчинність і погана пероральна абсорбція роблять їх малопридатними для системного застосування. Такі особливості визначають доцільність розгляду цих структур переважно як кандидатів для місцевих або трансдермальних лікарських форм.

Висновки. Дослідження продемонструвало, що N-(4-фторбензил)-3-(алкілтіо)-5-(тіофен-2-ілметил)-4Н-1,2,4-тріазол-4-аміни характеризуються сприятливим початковим токсикологічним профілем та потенційною активністю щодо фармакологічних мішеней. Загалом отримані результати підтверджують доцільність подальшого вивчення цього ряду як бази для створення нових фармакологічно активних агентів.

ОПТИМІЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ КІЛЬКІСНОГО СПІВВІДНОШЕННЯ ВВЕДЕНИХ КОМПОНЕНТІВ ДО СКЛАДУ АЕРОЗОЛЮ ДЛЯ ЛІКУВАННЯ РАНОВИХ ІНФЕКЦІЙ	113
<i>М. Попова, О. Салій, В. Страшний</i>	
НАПРЯМИ УДОСКОНАЛЕННЯ СТРАТЕГІЧНОГО УПРАВЛІННЯ НА ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ПІДПРИЄМСТВАХ	114
<i>О. Посилкіна, М. Дабіжса</i>	
СОЦІАЛЬНИЙ ІНТЕЛЕКТ ПЕРСОНАЛУ, ЯК ОСНОВА КАДРОВОЇ БЕЗПЕКИ ФАРМАЦЕВТИЧНИХ КОМПАНІЙ	115
<i>О. Посилкіна, А. Лісна</i>	
КЛІНІКО-МАРКЕТИНГОВА СТРАТЕГІЯ ДИФЕРЕНЦІАЦІЇ СУЧАСНИХ ТОПІЧНИХ ПРЕПАРАТІВ ДЛЯ ЛІКУВАННЯ МІКОЗУ СТОП НА ОТС-РИНКУ	116
<i>Р. Притула, І. Бушуєва</i>	
ПЕРСПЕКТИВИ РОЗРОБКИ КОМБІНОВАНИХ ЗАСОБІВ ДЛЯ ТЕРАПІЇ ВАГІНАЛЬНИХ КАНДИДОЗІВ	117
<i>І. Пухальська, Г. Лисянська, Д. Сафронова</i>	
ФАРМАЦЕВТИЧНА ДОПОМОГА ХВОРИМ НА РОЗСІЯНИЙ СКЛЕРОЗ В УКРАЇНІ: ПРОБЛЕМИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ.....	118
<i>С. Рижкова, Н. Ткаченко</i>	
ІШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ ТА КОГНІТИВНІ ТЕХНОЛОГІЇ НАВЧАННЯ В СИСТЕМІ ПІДГОТОВКИ ДО ІНТЕГРОВАНОГО ТЕСТОВОГО ІСПИТУ КРОК СПЕЦІАЛІЗАЦІЇ «ФАРМАЦІЯ»	119
<i>О. Рижов</i>	
МЕТОДИ КІЛЬКІСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ФЕКСОФЕНАДИНУ В ОБ'ЄКТАХ БІОЛОГІЧНОГО ПОХОДЖЕННЯ	121
<i>С. Романова, М. Михалків, І. Івануса, Я. Яцюк</i>	
ПОРІВНЯЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПОЛІСАХАРИДІВ ТРАВИ ВІВСУ ПОСІВНОГО СОРТІВ УКРАЇНСЬКОЇ СЕЛЕКЦІЇ	122
<i>А. Рудник, О. Хворост, Ю. Федченкова</i>	
ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ДЛЯ ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ФАРМАКОТЕРАПІЇ ВІЛ-ІНФЕКЦІЇ.....	123
<i>З. Рябоконт, С. Соловійов</i>	
ЕФЕКТИВНА СИСТЕМА УФ-ФІЛЬТРІВ У СКЛАДІ СОНЦЕЗАХИСНОГО ЗАСОБУ ДЛЯ ШКІРИ, СХИЛЬНОЇ ДО АКНЕ	124
<i>Т. Савицька</i>	
IN SILICO АНАЛІЗ ТОКСИЧНОСТІ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ 3- (АЛКІЛТІО)-N-(4-ФТОРБЕНЗИЛ)-5-(ТІОФЕН-2-ІЛМЕТИЛ)-4Н-1,2,4-ТІАЗОЛ-4-АМІНІВ	125
<i>А. Сафонов, В. Шульга</i>	
ПРОБЛЕМИ НАВЧАННЯ І РОЗВИТКУ ПЕРСОНАЛУ АПТЕК <u>3</u> УРАХУВАННЯМ ВИКЛИКІВ ВОЄННОГО ЧАСУ	126
<i>О. Севрюков</i>	
ОСОБЛИВОСТІ ЗМІШАНОЇ ФОРМИ НАВЧАННЯ ФАХІВЦІВ ФАРМАЦІЇ В УМОВАХ ВОЄННОГО СТАНУ В УКРАЇНІ.....	127
<i>О. Семенов, О. Заліська</i>	
АНАЛІЗ НОРМАТИВНИХ ДОКУМЕНТІВ І НАВЧАЛЬНОЇ ЛІТЕРАТУРИ З АПТЕЧНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ЛІКІВ НА ПРЕДМЕТ АКТУАЛЬНОГО СКЛАДУ РЕЦЕПТІВ.....	128
<i>О. Серебрякова</i>	
МАРКЕТИНГОВІ ДОСЛІДЖЕННЯ УКРАЇНСЬКОГО РИНКУ ДЕРМАТОЛОГІЧНИХ АНТИБАКТЕРІАЛЬНИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ ДЛЯ ТОПІЧНОГО ЗАСТОСУВАННЯ	129
<i>І. Скупий, О. Литвиненко, С. Гладішева</i>	
ДОСЛІДЖЕННЯ ВМІСТУ ЖИРНИХ КИСЛОТ У ТРАВІ ПОРТУЛАКУ ВЕЛИКОКВІТКОВОГО .	130
<i>Л. Слободянюк, Н. Оленюк</i>	