

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КАФЕДРА ФІЗИЧНОЇ РЕАБІЛІТАЦІЇ І ЗДОРОВ'Я**



**VIII науково-практична internet-конференція
з міжнародною участю**

**«МЕХАНІЗМИ РОЗВИТКУ ПАТОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І
ХВОРОБ ТА ЇХ ФАРМАКОЛОГІЧНА КОРЕКЦІЯ»**

**20 жовтня 2025 р.
ХАРКІВ – Україна**

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КАФЕДРА ФІЗИЧНОЇ РЕАБІЛІТАЦІЇ І ЗДОРОВ'Я**



**VIII науково-практична internet-конференція
з міжнародною участю**

**«МЕХАНІЗМИ РОЗВИТКУ ПАТОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І
ХВОРОБ ТА ЇХ ФАРМАКОЛОГІЧНА КОРЕКЦІЯ»**

**20 жовтня 2025 р.
ХАРКІВ – Україна**

**MINISTRY OF HEALTH OF UKRAINE
NATIONAL UNIVERSITY OF PHARMACY
DEPARTMENT OF PHYSICAL REHABILITATION AND HEALTH**



**VIIIth scientific and practical
internet-conference for the international participation**

**«MECHANISMS OF PATHOLOGICAL PROCESSES
DEVELOPMENT AND DISEASES,
THEIR PHARMACOLOGICAL CORRECTION»**

**October 20, 2025
KHARKIV – Ukraine**

УДК 615.1:616 (043.2)

Редакційна колегія: проф. Кухтенко О. С., проф. Половко Н. П., доц. Таможанська Г. В., проф. Кононенко Н. М.

Укладачі: доц. Селюкова Н. Ю.

Посвідчення № 848 Державної наукової установи «Український інститут науково-технічної експертизи та інформації» від 26.12.2024 р.

Механізми розвитку патологічних процесів і хвороб та їх фармакологічна корекція : матеріали VII науково-практичної internet-конференції з міжнародною участю, м. Харків, 20 жовтня 2025 р. Х. : НФаУ, 2025, 258 с.

Збірник містить матеріали VIII науково-практичної internet-конференції з міжнародною участю «Механізми розвитку патологічних процесів і хвороб та їх фармакологічна корекція». В матеріалах конференції розглянуто сучасні проблеми медицини і фармації: молекулярні основи патології, клітинні та гуморальні механізми розвитку захворювань; роль генетичних факторів у патогенезі захворювань; механізми розвитку патологічних процесів і хвороб; вікова патофізіологія; проблемні аспекти хвороб цивілізації; клінічна патофізіологія; питання викладання патофізіології; експериментальна терапія найбільш поширених захворювань; фармакологічна корекція патологічних процесів; проблеми та перспективи створення лікарських препаратів різної спрямованості дії; інформаційні технології і автоматизація наукових досліджень з розробки лікарських засобів; створення нутрицевтичних засобів та виробів медичного призначення; маркетингові дослідження сучасного фармацевтичного ринку; нанотехнології у фармації; таргетна терапія захворювань людини; трансляційна медицина; новітні технології діагностики та лікування; біомедичні технології; вплив сучасних технологій на здоров'я людини; актуальні питання фізичної реабілітації та сучасні технології збереження здоров'я людини; ментальне здоров'я та інновації у медико-психологічній реабілітації військовослужбовців в умовах воєнного стану; глобальні проблеми громадського здоров'я.

Для широкого кола наукових і практичних працівників медицини та фармації.

UDC 615.1:616 (043.2)

Editorial board: prof. Kukhtenko O. S., prof. Polovko N. P., assoc. prof. Tamozhanska H. V., prof. Kononenko N. M.

Compilers: assoc. prof. Seliukova N. Yu.

Certificate № 848 of the State scientific organization «Ukrainian Institute of Scientific and Technical Expertise and Information» dated 26.12.2024.

Mechanisms of pathological processes development and diseases, their pharmacological correction: collected papers of to the VIIIth scientific and practical internet-conference for the international participation, Kharkiv, October 20, 2025. Kh.: NUPh, 2025, 258 p.

Collected papers includes the materials of VIIth scientific and practical internet-conference for the international participation «Mechanisms of pathological processes development and diseases, their pharmacological correction». The modern problems of pathophysiology were considered the materials of the Conference: molecular basis of pathology, cellular and humoral mechanisms of disease development; role of genetic factors in the pathogenesis of diseases; mechanisms of pathological processes and diseases development; age-related pathophysiology; problematic aspects of the diseases of civilization; clinical pathophysiology; issues of pathophysiology teaching; experimental therapy of the most common diseases; pharmacological correction of pathological processes; problems and prospects for the development of medicines with different orientation of action; information technology and automation of scientific research on drug create; development of nutraceutical drugs and products for medical purpose; marketing research of the modern pharmaceutical market; nanotechnology in pharmacy; targeted therapy of human diseases; translational medicine; the latest diagnostic and treatment technologies; biomedical technologies; impact of modern technologies on human health; current issues of physical rehabilitation and modern technologies for preserving human health; mental health and innovations in medical and psychological rehabilitation of military personnel under martial law; global public health issues.

For a wide audience of scientific and practitioners of medicine and pharmacy.

UDC 615.1:616 (043.2)

© NUPh, 2025

MOLECULAR INSIGHTS INTO THE ANTI-INFLAMMATORY ACTIVITY OF 4-ALLYL-1,2,4-TRIAZOLE-3-THIOL DERIVATIVES

Fedchenko I. V., Kobzar N. P., Severina H. I.

National University of Pharmacy, Kharkiv, Ukraine;

¹Cherkasy Medical Academy, Cherkasy, Ukraine

severina.ai@ukr.net

Introduction. Inflammation is a fundamental component of the immune response; however, its chronic activation plays a key role in the pathogenesis of numerous diseases, ranging from rheumatoid arthritis to neurodegenerative disorders. Among the main enzymatic targets of pharmacological inflammation control are cyclooxygenase-2 (COX-2) and 5-lipoxygenase (5-LOX), which catalyze the biosynthesis of proinflammatory eicosanoids – prostaglandins and leukotrienes, respectively. Synergistic inhibition of both enzymes is considered a promising strategy for the development of multitarget anti-inflammatory agents with enhanced efficacy and reduced adverse effects. Derivatives of 4-allyl-1,2,4-triazole-3-thiol represent a promising class of compounds capable of interacting with the active sites of oxidoreductases due to the presence of a thiol group (-SH) and an azole fragment that functions as a donor–acceptor system. Their structural flexibility and high electron density determine the potential for selective binding to COX-2 and 5-LOX, leading to anti-inflammatory activity without the gastrointestinal toxicity typical of classical NSAIDs.

Aim. To investigate *in silico* the molecular mechanisms of binding of 4-allyl-1,2,4-triazole-3-thiol derivatives to the active sites of COX-2 and 5-LOX.

Materials and Methods. Molecular docking studies were performed using AutoDock Vina and Discovery Studio, employing the crystallographic structures of COX-2 (PDB ID: 5IKR) and 5-LOX (PDB ID: 3O8Y). For COX-2, the catalytic domain containing key amino acid residues Arg120, Tyr355, Ser530, and Val523 were analyzed; for 5-LOX, the active site included His367, Ala410, Leu607, and Glu372. Binding energies, complex geometries, and interaction types were evaluated and compared with reference inhibitors – celecoxib (COX-2) and zileuton (5-LOX).

Results. The investigated derivatives form stable complexes with the catalytic sites of COX-2, exhibiting hydrogen bonding with Arg120 and Ser530 and hydrophobic interactions with Tyr385 and Val523, which are characteristic of selective COX-2 inhibitors. The introduction of an allyl fragment enhances π – π stacking interactions with Tyr355 and Leu352, stabilizing the enzyme–ligand complex. For 5-LOX, coordination interactions with His367 and Glu372 were identified, potentially reducing leukotriene formation and oxidative stress. The calculated binding energies ranged from -8.5 to -9.8 kcal/mol for COX-2 and -8.1 to -9.3 kcal/mol for 5-LOX, indicating high affinity and activity comparable to the reference inhibitors.

Conclusions. The 4-allyl-1,2,4-triazole-3-thiol derivatives demonstrate strong affinity for the active sites of COX-2 and 5-LOX, suggesting their potential as dual inhibitors of the eicosanoid cascade, simultaneously modulating prostaglandin and leukotriene pathways. The obtained *in silico* results confirm the promise of this structural series as a foundation for the development of new selective multitarget anti-inflammatory agents with improved safety profiles.