

PLANTA+

НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА

SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION

28-29 січня 2025 р.
м. Київ, Україна

January 28-29, 2025
Kyiv, Ukraine

Том 2
Volume 2

20
25



МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ О.О. БОГОМОЛЬЦЯ
ІНСТИТУТ БОТАНІКИ ІМ. М.Г. ХОЛОДНОГО НАН УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

«PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА»

Матеріали
V Науково-практичної конференції з міжнародною участю,
присвяченої пам'яті доктора хімічних наук,
професорки Ніни Павлівни Максютіної
(до 100-річчя від дня народження)

Том 2

28-29 січня 2025 року
м. Київ

УДК 615.322.03:001.891](477+100)(082)

P71

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ

Мінарченко В. М., доктор біологічних наук, професор

Карнюк У. В., доктор фармацевтичних наук, професор

Махиня Л. М., кандидат біологічних наук, доцент

Підченко В. Т., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Чолак І. С., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Ковальська Н. П., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Ольшанський І.Г., кандидат біологічних наук

P71 PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА: матеріали V науково-практичної конференції з міжнародною участю, присвяченої пам'яті доктора хімічних наук, професорки Ніни Павлівни Максютіної (до 100-річчя від дня народження) (Київ, 28-29 січня 2025 р.). Київ : Паливода А. В., 2025. Т.2. 302 с.

ISBN 978-966-437-807-6 (Повне зібрання)

ISBN 978-966-437-784-0 (Том 2)

Збірник містить матеріали V науково-практичної конференції з міжнародною участю, присвяченої пам'яті доктора хімічних наук, професорки Ніни Павлівни Максютіної (до 100-річчя від дня народження) «PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА». У збірнику опубліковано результати наукових досліджень провідних вчених України та іноземних фахівців з питань фітохімічного аналізу, стандартизації лікарської рослинної сировини, інтродукції, ресурсознавства лікарських рослин. висвітлено питання технології та аналізу лікарських засобів рослинного походження, дієтичних добавок, лікувально-профілактичних та косметичних засобів. представлені фармакологічні дослідження з питань безпечності та застосування у клінічній практиці лікарських засобів рослинного походження. Розглянуто проблеми модернізації навчального процесу та орієнтації на дистанційне навчання у закладах освіти.

Матеріали представляють інтерес і можуть бути корисними для широкого кола наукових та науково-педагогічних працівників наукових установ, закладів вищої освіти фармацевтичного, медичного, біологічного профілю, докторантів, аспірантів, студентів, співробітників фармацевтичних підприємств та громадських організацій.

Друкується в авторській редакції. відповідальність за достовірність наданого для видання матеріалу несуть автори одноосібно. будь-яке відтворення тексту без згоди авторів забороняється. матеріали пройшли антиплагіатну перевірку за допомогою програмного забезпечення strikeplagiarism.

ISBN 978-966-437-807-6 (Повне зібрання)

ISBN 978-966-437-784-0 (Том 2)

© Національний медичний університет
імені О. О. Богомольця, 2025

© Колектив авторів, 2025

КОМП'ЮТЕРНЕ ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОХІДНОГО БУРШТИНОВОЇ КИСЛОТИ ЗА ДОПОМОГОЮ ПРОГРАМИ SWISS TARGET PREDICTIO (SWISS)

Абаронова І.А., Ніженковська І.В.

Національний медичний університет імені О.О. Богомольця
м. Київ, Україна

ivanochkakazak@gmail.com, iryna.nizhenkovska@gmail.com

Ключові слова: бурштинова кислота, токсичність, комп'ютерне прогнозування, біомішені, скаффолд.

Вступ. Бурштинова кислота широко використовується у різних областях промисловості - у виробництві фармацевтичних препаратів, косметичних засобів, фарб, клеїв, герметиків, пластифікаторів, барвників і пігментів. Суфан – це неглікозидний кардіотонік з кардіопротекторними властивостями. За хімічною будовою Суфан є похідним бурштинової кислоти, вплив якого досліджували при сублінгвальному та внутрішньовенному введенні у доклінічних дослідженнях. Відомо, що вплив Суфану призводить до помірної активації скорочувальної активності міокарду. Нами проведено аналіз особливостей хімічної структури Суфану за допомогою програми Swiss TargetPredictio для прогнозування не описаних раніше в доступній літературі властивостей Суфану, оскільки молекула містить конденсований гетероциклічний скаффолд та фармакофорні угруповання і може виявляти цілий спектр біологічних властивостей.

Матеріали та методи. Комп'ютерний аналіз: програми Swiss Target Predictio, Swiss-ADME, Protox-II; розрахунковий метод.

Результати та їх обговорення. За допомогою комп'ютерного прогнозування прогнозовано фізико-хімічні параметри Суфану: поворотні зв'язки молекули, види просторової ізомерії, Н-зв'язані донори та акцептори. Визначено значення молярної рефракції 78.87 см³/мол, значення ліпофільності - 0,14. Негативне значення ліпофільності не дозволяє проникненню молекули крізь біологічні мембрани та накопиченню речовини в клітинах і тканинах.

Висновки. За результатами аналізу прогнозовано потенційні біомішені впливу Суфану. Серед біомішеней відзначені ензими - 26,7% та іонні канали - 26,7%. Незначний відсоток потенційних біомішеней Суфану – це протеїн-зв'язані рецептори родини AG та протеази. Суфан (за гомологією) може розглядатися як потенційний лікарський засіб для лікування туберкульозу, хронічного гепатиту. Значення LD₅₀ Суфану 225 мг/кг (клас токсичності 3).

Перелік посилань:

1. Nizhenkovska I. The influence of sufam on myocardial energetic metabolism in case of Adriamycin-induced heart failure. *Current topics in pharmacology*. 2013. Vol. 17. P. 103-108.