

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

MINISTRY OF HEALTH OF UKRAINE
MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE
BOGOMOLET'S NATIONAL MEDICAL UNIVERSITY
M.G. KHOLODNY INSTITUTE OF BOTANY
NATIONAL UNIVERSITY OF PHARMACY

«PLANTA+. SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION»

**The proceedings
of the Fifth Scientific and Practical Conference with International
Participation, dedicated to the memory of Doctor of Chemistry
Professor Nina Pavlivna Maksyutina
(on her 100th birthday)**

Volume 2

**28-29 January 2025
Kyiv**

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 безпеки 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

Шановні колеги!

Науково-практична конференція PLANTA+ була започаткована у 2020 році і присвячена пам'яті доктора хімічних наук, професорки Ніни Павлівни Максютіної (до 95-річчя від дня народження). Натхненням до проведення цього наукового заходу стало бажання подякувати вчителю, колезі, вченому за багаторічну працю.

Перша конференція, проведена 19-20 лютого 2020 року, об'єднала дослідників і практиків. Було зроблено 55 усних та 28 постерних доповідей, опубліковано монографію «Життя у служінні науці. Книга спогадів до 95-річчя з дня народження професорки Ніни Павлівни Максютіної», в якій зібрано спогади колег, друзів, родичів, список публікацій з 1954 до 2013 рр, автобіографію, написану рукою Ніни Павлівни у 1965 р., фото архів.

В подальшому, незважаючи на пандемію, початок повномасштабного вторгнення російської федерації на територію незалежної України, конференція проходила в 2021, 2022, та 2023 рр. За роки проведення конференції участь в ній взяли майже 1500 учасників з України та більше 250 учасників з 17 країн світу. Розширюються напрямки проведення конференції, аудиторія. Традицією стає випуск 2-х томів збірки тез доповідей.

У 2025 році конференція PLANTA+ проводиться в п'яте, тобто є ювілейною і присвячується пам'яті доктора хімічних наук, професорки Ніни Павлівни Максютіної (до 100-річчя від дня народження).

Конференція проходить свій шлях. Формат проведення конференції цього року онлайн. Відокремлюється секція молодих вчених, яка сприятиме їхньому розвитку та обміну досвідом.

Організаційний комітет висловлює щирі вдячність всім учасникам конференції. Завдяки вашій вірі, праці, стійкості ідея об'єднання вчених, практиків, аспірантів, студентів медицини, фармації, біології, освіти продовжує жити в найтемніші часи.

Особливу подяку висловлюємо Збройним Силам України за можливість продовжувати нашу роботу у 2025 році!

*Організаційний комітет
V Науково-практичної конференції з міжнародною участю
«PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА»
присвяченої пам'яті доктора хімічних наук, професорки
Ніни Павлівни Максютіної
(до 100-річчя від дня народження)*



Географія країн учасниць з 2020 по 2025 рр

*З науковим шляхом
професорки Н.П. Максютіної
можна ознайомитись за посиланнями:*

<http://surl.li/rqszrb>
<http://surl.li/jjiqxx>

Address to the participants of the PLANTA+ conference

Dear colleagues!

The scientific and practical conference PLANTA+ was launched in 2020 and was dedicated to the memory of Doctor of Chemical Sciences, Professor Nina Pavlivna Maksyutina, on her 95th birthday. The inspiration for holding this scientific event was the desire to thank this teacher, colleague, and scientist for her many years of work.

The first conference, held on February 19-20, 2020, brought together an international group of researchers and practitioners who delivered 55 oral and 28 poster presentations in Kyiv. It also produced a monograph, “A life in the service of science: Book of memories for the 95th anniversary of the birth of Professor Nina Pavlivna Maksyutina,” containing the recollections of colleagues, friends, and relatives; a list of her publications from 1954 to 2013; an autobiography written by Nina Pavlivna in 1965; and a photo archive.

Despite the pandemic and later the full-scale invasion by the Russian Federation into the territory of sovereign Ukraine, the conference was held in 2021, 2022, and 2023. Over the years of the conference, almost 1,500 people from Ukraine and more than 250 from 17 other countries have participated. The subject areas of the conference and the audience continue to expand. The publication of 2 volumes of proceedings has started a tradition.

In 2025, the PLANTA+ conference will be held for the fifth time, and this anniversary conference is dedicated to the memory of Doctor of Chemical Sciences, Professor Nina Pavlivna Maksyutina, on her 100th birthday.

The conference now has a life of its own. The format of the conference this year is online. A separate section for young scientists will contribute to their development and help them experience scientific exchange.

The organizing committee expresses sincere gratitude to all participants of the conference. Thanks to your faith, to your work, and to your perseverance, the idea of uniting scientists, practitioners, graduate students, and students – of medicine, pharmacy, biology, and education – continues to live in the darkest times.

We owe special gratitude to the Armed Forces of Ukraine; because of them we have the opportunity to continue our work in 2025!

*Organizing committee of
the Fifth Scientific and Practical Conference
with International Participation
«PLANTA+. SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION»,
dedicated to the memory of Doctor of Chemistry, Professor
Nina Pavlivna Maksyutina (on her 100th birthday)*



Geography of participating countries from 2020 to 2025

*You can read about the scientific path of
Professor N.P. Maksyutina
at the following links:*

<http://surl.li/rqszrb>

<http://surl.li/jjiqxc>

ПРОГНОЗУВАННЯ ГОСТРОЇ ТОКСИЧНОСТІ *IN SILICO* МЕРКАПТОПОХІДНИХ (ПІРИДИН-2-ІЛ)ВІНІЛФОСФОНОВИХ КИСЛОТ ТА 3-(АРИЛТІО)ІМІДАЗО[1,2-*a*]ПІРИДИН-2-ІЛФОСФОНОВОЇ КИСЛОТИ

Липовенко Т.О., Головченко О.І., Шабелько Ю.О.

Національний медичний університет імені О.О. Богомольця,

м. Київ, Україна

ІБОНХ ім. В.П. Кухаря НАН України

lipovenkot@gmail.com, oks.iv.golovchenko@gmail.com,

shyshatska.yulia15@gmail.com

Ключові слова: фосфонові кислоти, гостра токсичність, скринінг.

Вступ. Одним із перших етапів створення нових лікарських засобів є прогнозування їх гострої токсичності *in silico*, який дозволяє оцінити біологічну активність певної сполуки.

Геретоциклічна система імідазо[1,2-*a*]піридину є основою групи природних біологічно активних речовин та лікарських засобів, які мають широкий спектр фармакологічної дії. Серед них відомі лікарські засоби, які виявляють кардіотонічну, снодійну та седативну дію, анксиолітичні властивості та противиразкову активність [2]. У цій хімічній групі також виявлено інгібітори протонної помпи, інгібітори ароматази та НПЗЗ та препарати, які проявляють протипухлинну активність проти клітин раку молочної залози [3].

Меркаптопохідні (піридин-2-іл)вінілфосфонових кислот та 3-(арилтіо)імідазо[1,2-*a*]піридин-2-ілфосфонові кислоти є перспективними субстратами для розробки нових потенційних лікарських засобів з різним спектром фармакологічної активності.

Для передбачення гострої токсичності сполук *in silico* використовують програмне забезпечення GUSAR-online (General Unrestricted Structure-Activity Relationships). General Unrestricted Structure-Activity Relationships – це програма, яка шляхом скринінгу дає можливість отримати інформацію щодо передбачення гострої токсичності сполук, які надалі можуть з'явитися на ринку як лікарські засоби.

За допомогою програмного забезпечення GUSAR-online (General Unrestricted Structure-Activity Relationships) дослідники можуть одержати розрахунки середньолетальної дози (LD₅₀), використовуючи різні шляхи введення (перорально, внутрішньовенно, внутрішньоочеревинно, підшкірно) для сполук [1].

Також встановити клас токсичності відповідно класифікації OECD (Organisation for Economic Co-operation and Development), до якого належить сполука згідно отриманих результатів. Середньолетальна доза (LD₅₀) – це одна з вагомих характеристик при дослідженні гострої токсичності, тому що це значення відповідає дозі, яка спричиняє 50% смертності протягом 24 годин після введення [1].

Матеріали та методи. Для дослідження гострої токсичності диетилового естеру [(E)-2-[(4-хлорофеніл)тіо]-1-(піридин-2-іламіно)вініл]фосфонові

кислоти (I), диетилового естеру [2,2-біс[(4-хлорофеніл)тіо]-1-(піридин-2-іламіно)вініл]фосфонової кислоти (II) та диетилового естеру {3-[(4-хлорофеніл)тіо]імідазо[1,2-*a*]піридин-2-іл}фосфонової кислоти (III) у щурів, використовуючи різні шляхи введення, був використаний метод комп'ютерного моделювання. До числа сучасних комп'ютерних програм, за допомогою яких можна зпрогнозувати гостру токсичність нових синтезованих сполук, відноситься програма GUSAR-online (General Unrestricted Structure-Activity Relationships), яка також дозволяє кількісно оцінити залежність між «структура-активність» та «структура-властивість».

Результати та їх обговорення. Розглянувши результати дослідження, можна зробити висновок, що сполука I - диетиловий естер [(E)-2-[(4-хлорофеніл)тіо]-1-(піридин-2-іламіно)вініл]фосфонової кислоти належить до 4-го класу токсичності «практично нетоксичні сполуки» при внутрішньочеревному, внутрішньовенному, пероральному шляхах введення, а також до 5-го класу токсичності «відносно нетоксичні сполуки» при підшкірному шляху введення шурам (за класифікацією OECD). Сполука II - диетиловий естер [2,2-біс[(4-хлорофеніл)тіо]-1-(піридин-2-іламіно)вініл]фосфонової кислоти) відноситься до 4-го класу токсичності «практично нетоксичні сполуки» при внутрішньочеревному, внутрішньовенному, пероральному шляхах введення, а також є нетоксичною при підшкірному шляху введення. Сполуку III - диетиловий естер {3-[(4-хлорофеніл)тіо]імідазо[1,2-*a*]піридин-2-іл}фосфонової кислоти можна віднести до 4-го класу токсичності «практично нетоксичні сполуки» при внутрішньочеревному, внутрішньовенному, пероральному шляхах введення, а також до 5-го класу токсичності «відносно нетоксичні сполуки» при підшкірному шляху введення шурам (за класифікацією OECD).

Висновки. В ході даного дослідження було проведено GUSAR-online прогнозування для меркаптопохідних (піридин-2-іл)вінілфосфонових кислот і 3-(арилтіо)імідазо[1,2-*a*]піридин-2-ілфосфонової кислоти та встановлено, що дані сполуки належать до 4 та 5 класів токсичності, крім того сполука (II) при підшкірному введенні є нетоксичною за класифікацією OECD. Це дозволяє проводити серед такого типу сполук пошук перспективних лікарських засобів з різною фармакологічною дією [3].

Перелік посилань:

1. Alexey Lagunin, Alexey Zakharov, Dmitry Filimonov, Vladimir Poroikov. QSAR Modelling of Rat Acute Toxicity on the Basis of PASS Prediction:241.
2. Devi N, Singh D, Rawal RK, Bariwal J, Singh V (2016) Medicinal Attributes of Imidazo[1,2-*a*]pyridine Derivatives: An Update. Current Topics in Medicinal Chemistry 16(26): 2963–2994.
3. Sergii Demchenko, Sergii Yarmoluk, Volodymyr Sukhovieiev, Oleksandr Golovchenko, Oleksandr Sukhovieiev, Anatolii Demchenko. Syntheses and evaluation of novel 3-hydroxy1,3-diaryl-2,3,5,6,7,8-hexahydro-imidazo[1,2-*a*] pyridine-1-ium bromides as potential anticancer agents.