



COLLECTION DE PAPIERS SCIENTIFIQUES SUR LES MATÉRIAUX DE LA

VII CONFÉRENCE SCIENTIFIQUE ET PRATIQUE INTERNATIONALE

«Débats scientifiques et orientations
prospectives du développement scientifique»



Paris
République française



4 Avril
2025



**SCI SORBONNE &
Plateforme scientifique européenne**



ISBN (en ligne) 978-2-37467-150-5
ISBN (imprimer) 978-617-8440-66-4

DOI 10.36074/logos-04.04.2025

99

SCI SORBONNE | European Scientific Platform



COLLECTION DE PAPIERS SCIENTIFIQUES

SUR LES MATÉRIAUX DE LA
VIII CONFÉRENCE SCIENTIFIQUE ET PRATIQUE INTERNATIONALE

«**DÉBATS SCIENTIFIQUES ET ORIENTATIONS PROSPECTIVES DU DÉVELOPPEMENT SCIENTIFIQUE**»



Paris,
République française



4 Avril,
2025



République française
«La Fedeltà»

Ukraine
«UKRLOGOS Group»

2025

UDC 082:001
D 29



*Président du comité d'organisation: Goldenblat M.¹
Vice-président du comité d'organisation: Blandin G.²*

L'organisation au nom de laquelle le livre est publié:

¹ PO Plateforme scientifique européenne, Ukraine

² SCI SORBONNE, République française

Responsable de la mise en page: Bilous T.

Responsable de la conception: Bondarenko I.

Recommended for publication by the Academic Council of the Institute of Scientific and Technical Integration and Cooperation. Protocol № 13 from April 3rd, 2025.

D 29 **Débats scientifiques et orientations prospectives du développement scientifique:** c avec des matériaux de la VIII conférence scientifique et pratique internationale, Paris, 4 avril 2025. Paris-Vinnytsia: La Fedeltà & UKRLOGOS Group LLC, 2025.

ISBN 978-617-8440-66-4

UKRLOGOS Group LLC, Ukraine

ISBN 978-2-37467-150-5 (PDF)

«La Fedeltà», République française

DOI 10.36074/logos-04.04.2025

Les résumés et articles des participants à la VIII conférence multidisciplinaire scientifique et pratique internationale «Débats scientifiques et orientations prospectives du développement scientifique», qui s'est tenue à Paris le 4 avril 2025, sont présentés.



The conference is certified by Euro Science Certification Group
(**Certificate № 22886 dated February 10, 2025**);

The conference is also included in the catalog of International Scientific Conferences by ResearchBib; and registered by State Scientific Institution «Ukrainian institute of scientific and technical expertise and information» in the database «Scientific and technical events of Ukraine» (**Certificate № 416 dated 12 June 2024**).



Bibliographic descriptions of the conference proceedings are indexed by Google Scholar, CrossRef, OpenAIRE, OUCI, Scilit, Semantic Scholar, Mendeley, WorldCat and ORCID.

UDC 082:001

© Le collectif des participants à la conférence, 2025

© UKRLOGOS Group LLC, 2025

© SCI SORBONNE, 2025

© Plateforme scientifique européenne, 2025

© La Fedeltà, 2025

ISBN 978-617-8440-66-4

ISBN 978-2-37467-150-5 (PDF)

DOI 10.36074/logos-04.04.2025.074

QSAR ПРОГНОЗУВАННЯ ПЕЧІНКОВОГО МЕТАБОЛІЧНОГО КЛІРЕНСУ ОРГАНІЧНИХ ЛІКАРСЬКИХ РЕЧОВИН

Пустільнік Володимир Сергійович¹

Науковий керівник: Пушкарьова Ярослава Миколаївна²

1. здобувач вищої освіти фармацевтичного факультету

Національний медичний університет імені О.О. Богомольця, УКРАЇНА

2. канд. хім. наук, доцент, доцент кафедри аналітичної, фізичної та колоїдної хімії

Національний медичний університет імені О.О. Богомольця, УКРАЇНА

ORCID ID: 0000-0001-9856-7846

Актуальність теми полягає в необхідності підвищення ефективності та безпеки процесу розробки нових лікарських засобів. Прогнозування метаболічного кліренсу на ранніх етапах досліджень дозволяє значно скоротити час і витрати, що йдуть на експериментальні дослідження, а також дозволяє уникнути зайвих фінансових та часових витрат на дослідження лікарських засобів, що не відповідатимуть фармакокінетичним вимогам. Це особливо важливо, оскільки саме метаболічний кліренс, зокрема, печінковий, визначає основні характеристики лікарських засобів, такі як тривалість дії, концентрація активної речовини в організмі та потенційні побічні ефекти.

Використання методів QSAR дає змогу ефективно прогнозувати ці властивості на основі структурно-активних взаємозв'язків, що значно спрощує і пришвидшує процес розробки. Крім того, таке прогнозування сприяє зменшенню ризиків токсичності та негативного впливу лікарських засобів, що є однією з основних причин відмови на пізніх етапах клінічних досліджень. Застосування QSAR-моделювання також має важливе значення для персоналізованої медицини, оскільки дозволяє розробляти лікарські засоби з прогнозованими індивідуальними фармакокінетичними характеристиками [1, 2].

Програмне забезпечення – Matlab R2023b (trial individual license) [3], ChemOffice 2020 (trial individual license) [4].

Масив даних для дослідження – 41 органічна лікарська речовина, що характеризуються набором із 19 фізико-хімічних, топологічних та електронних

дескрипторів. Досліджені лікарські речовини випадковим чином були поділені на навчальну (35 речовин) та тестову вибірки (6 речовин). Значення електронних дескрипторів взяті із наукової літератури [1], значення фізико-хімічних та топологічних дескрипторів розраховані за допомогою програмного забезпечення ChemOffice 2020.

Висновки. У результаті застосування та аналізу множинної лінійної регресії встановлено, що оптимальним для прогнозування печінкового метаболічного кліренсу органічних лікарських речовин виявився набір із 3 дескрипторів: торсійна енергія, енергія найнижчої незаселеної молекулярної орбіталі та кількість акцепторів водневих зв'язків. Коефіцієнт кореляції між експериментальними та прогнозованими значеннями печінкового метаболічного кліренсу речовин тестової вибірки становить 0,919. Отримані результати можуть бути використані для розробки нових підходів до оптимізації фармакокінетичних властивостей органічних лікарських речовин, що сприятиме підвищенню ефективності ранніх етапів досліджень.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ:

- [1] Li, H., Sun, J., Sui, X., Liu, J., Yan, Z., Liu, X., ... & He, Z. (2009). First-principle, structure-based prediction of hepatic metabolic clearance values in human. *European journal of medicinal chemistry*, 44(4), 1600-1606.
- [2] Riley, R. J., McGinnity, D. F., & Austin, R. P. (2005). A unified model for predicting human hepatic, metabolic clearance from in vitro intrinsic clearance data in hepatocytes and microsomes. *Drug Metabolism and Disposition*, 33(9), 1304-1311.
- [3] <https://www.mathworks.com/products.html>
- [4] <https://chemistrydocs.com/perkinelmer-chemoffice-2020-version-20-0/>

