

Non-governmental Organization
International Center of Scientific Research



PROCEEDINGS OF THE
VIII INTERNATIONAL SCIENTIFIC
AND THEORETICAL CONFERENCE

SCIENTIFIC FORUM:
THEORY AND PRACTICE
OF RESEARCH

21.03.2025

SAN FRANCISCO
USA

SCIENTIA
COLLECTION OF SCIENTIFIC PAPERS

with the proceedings of the

VIII International Scientific and Theoretical Conference

**Scientific forum: theory
and practice of research**

21.03.2025

San Francisco, USA

San Francisco, 2025



Chairman of the Organizing Committee: Goldenblat M.

Responsible for the layout: Babych Yu.

Responsible designer: Bondarenko I.

- S 40 **Scientific forum: theory and practice of research:** collection of scientific papers «SCIENTIA» with Proceedings of the VIII International Scientific and Theoretical Conference, March 21, 2025. San Francisco, USA: International Center of Scientific Research.

ISBN 979-8-89660-286-6 (series)  Bowker

DOI 10.36074/scientia-21.03.2025

Papers of participants of the VIII International Multidisciplinary Scientific and Theoretical Conference «Scientific forum: theory and practice of research», held on March 21, 2025 in San Francisco are presented in the collection of scientific papers.

The conference is included in the Academic Research Index ReserchBib International catalog of scientific conferences and registered for holding on the territory of Ukraine in UKRISTEI (Certificate № 119 dated January 6th, 2025).



Conference proceedings are publicly available under terms of the Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License (CC BY-SA 4.0) at the www.previous.scientia.report.

UDC 082:001

SECTION 20.

PHARMACY AND PHARMACOTHERAPY

Пробита Аліна Андріївна

здобувач вищої освіти фармацевтичного факультету
Національний медичний університет імені О.О. Богомольця, Україна

Науковий керівник: Пушкарьова Ярослава Миколаївна 

канд. хім. наук, доцент, доцент кафедри аналітичної, фізичної та колоїдної хімії
Національний медичний університет імені О.О. Богомольця, Україна

QSPR ПРОГНОЗУВАННЯ ЛІПОФІЛЬНОСТІ ОРГАНІЧНИХ ЛІКАРСЬКИХ РЕЧОВИН

Ліпофільність є критичним параметром для визначення біодоступності та фармакокінетики лікарських засобів, що впливає на ефективність і безпеку терапії. Прогнозування ліпофільності на ранніх етапах розробки лікарських речовин дозволяє знизити час і витрати на експериментальні дослідження, що робить процес розробки більш ефективним. Враховуючи швидкий розвиток методів QSPR (Quantitative Structure-Activity Relationship) та застосування штучного інтелекту, прогнозування ліпофільності є важливим інструментом у створенні ліків з покращеними фармакокінетичними властивостями. Це сприяє більш точному підбору препаратів для персоналізованого лікування, знижує ймовірність побічних ефектів і покращує терапевтичні результати. Таким чином, дослідження в цій галузі є актуальним для удосконалення процесу розробки лікарських засобів, що відповідають сучасним міжнародним стандартам і вимогам фармацевтичної науки [1, 2].

Мета дослідження – застосування методології QSPR для прогнозування ліпофільності органічних лікарських речовин.

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

Масив даних для дослідження – 106 органічних лікарських речовин, що характеризуються набором із 9 фізико-хімічних, топологічних та електронних дескрипторів. Досліджені лікарські речовини випадковим чином були поділені на навчальну (88 речовин) та тестову вибірку (18 речовин). Значення електронних дескрипторів взяті із наукової літератури [5], значення фізико-хімічних та топологічних дескрипторів розраховані за допомогою

програмного забезпечення ChemOffice 2020.

Висновки. У результаті застосування та аналізу множинної лінійної регресії встановлено, що для прогнозування ліпофільності органічних лікарських речовин достатнім є набір із 5 дескрипторів: основність водневих зв'язків, дипольність / поляризованість, надлишкова молекулярна рефракція, молекулярна маса та площа полярної поверхні. Коефіцієнт кореляції між прогнозованими та експериментальними значеннями ліпофільності речовин тестової вибірки становить 0,846.

Список використаних джерел:

1. Saaipour, S. (2014). Prediction of drug lipophilicity using back propagation artificial neural network modeling. *Oriental Journal of Chemistry*, 30(2), 793.
2. Pushkarova, Y., & Tymchenko, I. (2024). Prediction of oral drug bioavailability based on chemical structure. *Сучасна медицина, фармація та психологічне здоров'я*, 4(18), 104.
3. <https://www.mathworks.com/products.html>
4. <https://chemistrydocs.com/perkinelmer-chemoffice-2020-version-20-0/>
5. Ashrafi, A., Teimouri, K., Aghazadeh, F., & Shayanfar, A. (2024). Neural Network Models for Predicting Solubility and Metabolism Class of Drugs in the Biopharmaceutics Drug Disposition Classification System (BDDCS). *European Journal of Drug Metabolism and Pharmacokinetics*, 49(1), 1-6.