

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

З МАТЕРІАЛАМИ ІХ МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

21 БЕРЕЗНЯ 2025 РІК

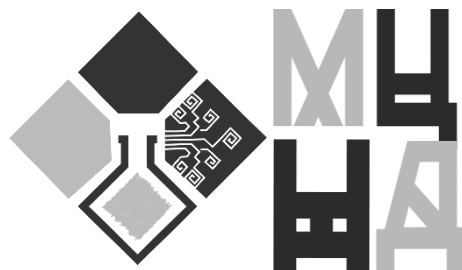
М. ТЕРНОПІЛЬ, УКРАЇНА

«НАУКОВІ ТРЕНДИ

ПОСТІНДУСТРІАЛЬНОГО СУСПІЛЬСТВА»



ЗБІРНИК НАУКОВИХ
ПРАЦЬ З МАТЕРІАЛАМИ
ІХ МІЖНАРОДНОЇ
НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ



НАУКОВІ ТРЕНДИ ПОСТІНДУСТРІАЛЬНОГО СУСПІЛЬСТВА

| 21 березня 2025 рік
м. Тернопіль, Україна

Вінниця, Україна
«UKRLOGOS Group»
2025

Організація, від імені якої випущено видання:

ГО «Міжнародний центр наукових досліджень»

Номер запису організації в Єдиному реєстрі громадських об'єднань: 1499141.

Голова оргкомітету: Сотник С.Г.

Верстка: Бабиш Ю.В.

Дизайн: Бондаренко І.В.

Рекомендовано до видання Вченою Радою Інституту науково-технічної інтеграції та співпраці. Протокол № 11 від 20.03.2025 року.



Конференцію зареєстровано Державною науковою установою у сфері управління Міністерства освіти і науки «Український інститут науково-технічної експертизи та інформації» в базі даних науково-технічних заходів України на поточний рік та бюлетені «План проведення наукових, науково-технічних заходів в Україні» (**Посвідчення № 92 від 06.01.2025**).

Збірник наукових праць з матеріалами конференції видано офіційно суб'єктом видавничої справи зі **Свідомством ДК № 7860 від 22.06.2023**.

Матеріали конференції знаходяться у відкритому доступі на умовах ліцензії Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License (CC BY-SA 4.0).

Т 38 **Наукові тренди постіндустріального суспільства:** збірник наукових праць з матеріалами IX Міжнародної наукової конференції, м. Тернопіль, 21 березня, 2025 р. / Міжнародний центр наукових досліджень. — Вінниця: ТОВ «УКРЛОГОС Груп, 2025. — 330 с.

ISBN 978-617-8440-60-2

DOI 10.62731/mcnd-21.03.2025

Викладено матеріали учасників IX Міжнародної наукової конференції «Наукові тренди постіндустріального суспільства», яка відбулася 21 березня 2025 року у місті Тернопіль.

УДК 082:001

© Колектив учасників конференції, 2025

© ГО «Міжнародний центр наукових досліджень», 2025

ISBN 978-617-8440-60-2

© ТОВ «УКРЛОГОС Груп», 2025

СЕКЦІЯ XVIII. ФАРМАЦІЯ ТА ФАРМАКОТЕРАПІЯ

QSPR ПРОГНОЗУВАННЯ ВОДНОЇ РОЗЧИННОСТІ ЛІКОПОДІБНИХ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК

Ізмаїлов Раїм Муслімович

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

Науковий керівник: Пушкарьова Ярослава Миколаївна

ORCID ID: 0000-0001-9856-7846

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

Водна розчинність є одним із ключових параметрів, що визначає фармакокінетику та біодоступність лікарських речовин. Низька або надмірна розчинність може обмежувати ефективність потенційних лікарських кандидатів, що робить оцінку цього параметра критично важливою на ранніх етапах розробки лікарських засобів. Експериментальне визначення розчинності часто є затратним і тривалим процесом. Застосування методів кількісного співвідношення структура–властивість (QSPR) дозволяє швидко та ефективно прогнозувати цей показник, що сприяє раціональному дизайну сполук. Використання QSPR-моделей допомагає зменшити кількість необхідних лабораторних експериментів, оптимізувати відбір перспективних сполук та прискорити розробку нових молекул з бажаними властивостями для фармакологічного застосування [1, 2].

Мета дослідження – оцінити ефективність методології QSPR для прогнозування водної розчинності лікоподібних органічних сполук.

Програмне забезпечення – Matlab R2023b (trial individual license) [3].

Масив даних для дослідження – 85 лікоподібних органічних сполук, що характеризуються набором із 17 дескрипторів: молекулярна маса (molecular weight), логарифм розподільного коефіцієнта (logP), кількість донорів водневих зв'язків (hydrogen bond donor count), кількість акцепторів водневих зв'язків (hydrogen bond acceptor count), кількість

оберткових зв'язків (rotatable bond count), точна маса (exact mass), моноізотопна маса (monoisotopic mass), топологічна площа полярної поверхні (topological polar surface area), кількість важких атомів (heavy atom count), формальний заряд (formal charge), молекулярна складність (complexity), кількість ізотопних атомів (isotope atom count), кількість визначених стереоцентрів атомів (defined atom stereocenter count), кількість невизначених стереоцентрів атомів (undefined atom stereocenter count), кількість визначених стереоцентрів зв'язків (defined bond stereocenter count), кількість стереоцентрів (асиметричних атомів) в молекулі (undefined bond stereocenter count), кількість ковалентно зв'язаних одиниць (covalently-bonded unit count). Значення цих фізичних та хімічних властивостей були отримані з бази даних PubChem [4]. Досліджені органічні лікоподібні сполуки випадковим чином були поділені на навчальну (75 сполук) та тестову вибірки (10 сполук).

Висновки. Для отримання найкращої QSPR-моделі було проведено:

- перевірку дескрипторів на мультиколінеарність,
- аналіз множинної лінійної регресії,
- перевірку залишків на нормальність.

Найкраще отримане рівняння, що описує водну розчинність органічних лікоподібних сполук, включає 4 дескриптори: логарифм розподільчого коефіцієнта, моноізотопну масу, топологічну площу полярної поверхні та кількість невизначених стереоцентрів атомів. Коефіцієнт кореляції між прогнозованими та експериментальними значеннями водної розчинності лікоподібних сполук тестової вибірки становить 0,857.

Список використаних джерел:

1. Ghasemi, J., & Saaidpour, S. (2007). QSPR prediction of aqueous solubility of drug-like organic compounds. *Chemical and pharmaceutical bulletin*, 55(4), 669-674.
2. Duchowicz, P. R., Talevi, A., Bruno-Blanch, L. E., & Castro, E. A. (2008). New QSPR study for the prediction of aqueous solubility of drug-like compounds. *Bioorganic & medicinal chemistry*, 16(17), 7944-7955.
3. <https://www.mathworks.com/products.html>
4. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>