

PLANTA+

НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА

SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION

23 січня 2026 р.
м. Київ, Україна

January 23, 2026
Kyiv, Ukraine

Том 1
Volume 1

20
26



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
ОПОЛЬСЬКИЙ УНІВЕРСИТЕТ

«PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА»

**Матеріали
VI Науково-практичної конференції з міжнародною участю**

Том 1

**23 січня 2026 року
м. Київ**

ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ДИГІДРОКСИПОХІДНОЇ УРАЦИЛУ ЗА ДОПОМОГОЮ ПРОГРАМИ КОМП'ЮТЕРНОГО ПРОГНОЗУВАННЯ

Гаврющенко А.А., Ніженковська І.В.

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

gavrushenko7@gmail.com, iryna.nizhenkovska@gmail.com

Ключові слова: Карбіцил, урацил, SwissTargetPredictio, біомішені, ліганди.

Вступ. Карбіцил ((1,3-біс-(2-гідроксіетил)піримідин-2,4(1H,3H)-діон) – речовина нестероїдної структури, науково-дослідний препарат, який було розроблено українським фармакологом, академіком І.С. Чекманом. Препарат має виражену кардіотонічну дію, що активує енергетичний обмін у міокарді. Карбіцил одним із перших лікарських засобів було створено на основі теорії комплексоутворення ліків із біомембранами. Карбіцил застосовується в експериментальних дослідженнях для вивчення впливу на серцево-судинну систему [1, 2].

Матеріали та методи. Swiss TargetPredictio, Protox, дослідження *in silico*, CADD (Computer-aided drug design), iLOGP, BOILED-Egg, фізико-хімічні фільтри Lipinski, Veber, Egan; Bioavailability платформа.

Результати та їх обговорення. За допомогою платформи AI Tools технології проаналізовано особливості будови Карбіцилу та прогнозовано його фізико-хімічні, фармакокінетичні, медико-хімічні та фармакологічні властивості. Молекула Карбіцилу містить *кількість поворотних зв'язків* 4 (це прогнозує його високу біодоступність); молекулярна маса Карбіцилу відповідає *діапазону* $150 \text{ g/mol} < MW < 500 \text{ g/mol}$ та відповідає вимогам до малих органічних молекул, *полярність* Карбіцилу ($20 \text{ A}^{\circ 2} < \text{TPSA} < 130 \text{ A}^{\circ 2}$) позитивна для проходження через клітинні мембрани ШКТ, Карбіцил є *гідрофільною* речовиною (1.07-5.37), значення його біодоступності 0.55.

Висновки. Аналіз структури Карбіцилу (Lipinski, Veber, Egan) вказує на високу спорідненість Карбіцилу до ліків. Прогнозовані біомішені Карбіцилу: 33.3% - ензими, 20.0% - ліази, 20.0% - електрохімічні переносники. За допомогою аналізу комбінаторних бібліотек встановлено 400 його структурних аналогів.

Перелік посилань:

1. Богданов В.Л. 70-річчя члена-кореспондента НАН України І.С. Чекмана // Вісн. НАН України. — 2006. — № 10.
2. Свінціцький А.С., Загородний М.І. Навчально-методичні засади викладання питань клінічної фармакології метаболічних препаратів у рамках дисципліни «Внутрішня медицина». Медична освіта Практикуючий лікар. 2024, № 3. С. 128-131.

Syrotchuk O.A., Afanasenko O.V., Husieva A.I. DEVELOPMENT OF MODERN QUALITY CRITERIA FOR A GLUTAMINE-CONTAINING DIETARY SUPPLEMENT	208
Syrotchuk O.A., Afanasenko O.V., Kovalenko O.Y. DEVELOPMENT OF MODERN QUALITY STANDARDS FOR A DIETARY SUPPLEMENT CONTAINING ESSENTIAL OILS	209
Yevpat I.V., Lisowska-Myjak B., Kuznetsova O.V., Nizhenkovska I.V. FcRn-DEPENDENT DRUG TRANSPORT: POTENTIAL FOR STUDY DURING PREGNANCY	210
Андрішаук В. І., Дмитрів А. М. ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ АНАЛІЗ ТА ОЦІНКА ЯКОСТІ ОЧНИХ КРАПЕЛЬ «СУЛЬФАЦИЛ»	211
Бабій Б.С., Рева Т.Д. КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ АТЕНОЛОЛУ У ТАБЛЕТКАХ	213
Брушківська О. Ю., Зайцева Г. М. СОРБЦІЙНО-СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЦИНК ОКСИДУ У М'ЯКИХ ЛІКАРСЬКИХ ФОРМАХ	214
Булавин Л.П., Мелешко Р.А. ІДЕНТИФІКАЦІЯ ТА ВСТАНОВЛЕННЯ КІЛЬКІСНОГО ВМІСТУ МЕТОДОМ ВЕРХ ГІДРОХЛОРТИАЗИДУ, АМЛОДИПІНУ Й ВАЛСАРТАНУ В СУБСТАНЦІЇ ЛІКАРСЬКОГО ЗАСОБУ	215
Вакулович А.Ю., Чхало О.М. КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ХЛОРТАЛІДОНУ МЕТОДОМ СПЕКТРОФОТОМЕТРІЇ	216
Васюк С. О., Коржова А. С. СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ АМЛОДИПІНУ ЗА РЕАКЦІЄЮ З ДІАЗОЛЕМ ЧЕРВОНИМ 2Ж	217
Гаврющенко А.А., Ніженковська І.В. ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ДИГІДРОКСИПОХІДНОЇ УРАЦИЛУ ЗА ДОПОМОГОЮ ПРОГРАМИ КОМП'ЮТЕРНОГО ПРОГНОЗУВАННЯ	219
Гаєвська О.В., Чхало О.М. КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ТИНІДАЗОЛУ У ТВЕРДІЙ ЛІКАРСЬКІЙ ФОРМІ	220
Головченко О.І., Головченко О.В., Терновенко М.О. СИНТЕЗ НОВИХ ПЕРСПЕКТИВНИХ АНТИМІКРОБНИХ АГЕНТІВ НА ОСНОВІ ПОХІДНИХ ІМІДАЗОЛУ	221
Гребенюк А.І., Рева Т.Д. КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ КАЛЬЦІЙ АТОРВАСТАТИНУ У ТВЕРДИХ ЛІКАРСЬКИХ ФОРМАХ	222
Денисенко В.Л., Рева Т.Д. РОЗРОБКА МЕТОДИКИ КІЛЬКІСНОГО СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АФІ КЕТОТИФЕН	223