

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

З МАТЕРІАЛАМИ XI МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

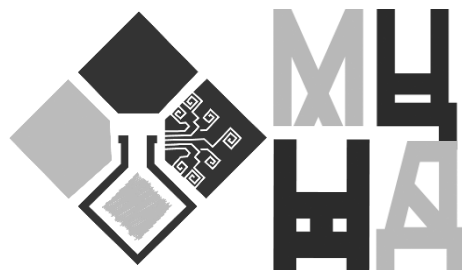
6 ЛЮТОГО 2026 РІК

М. ЧЕРНІВЦІ, УКРАЇНА

**«ТЕХНОЛОГІЇ, ІНСТРУМЕНТИ ТА СТРАТЕГІЇ
РЕАЛІЗАЦІЇ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ»**



ЗБІРНИК НАУКОВИХ
ПРАЦЬ З МАТЕРІАЛАМИ
ХІ МІЖНАРОДНОЇ
НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ



ТЕХНОЛОГІЇ, ІНСТРУМЕНТИ ТА СТРАТЕГІЇ РЕАЛІЗАЦІЇ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

| 6 лютого 2026 рік
м. Чернівці, Україна

Вінниця, Україна
«UKRLOGOS Group»
2026

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: Білоус Т.В.

Дизайн: Бондаренко І.В.

Рекомендовано до видання Вченою Радою Інституту науково-технічної інтеграції та співпраці. Протокол № 4 від 05.02.2026 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 № 511 від 10.06.2025**).

Збірник наукових праць з матеріалами конференції видано офіційно суб'єктом видавничої справи зі **Свідцтвом 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 **Технології, інструменти та стратегії реалізації наукових досліджень:** збірник наукових праць з матеріалами XI Міжнародної наукової конференції, м. Чернівці, 6 лютого, 2026 р. / Міжнародний центр наукових досліджень. — Вінниця: ТОВ «УКРЛОГОС Груп, 2026. — 318 с.

ISBN 978-617-8582-16-6

DOI 10.62731/mcnd-06.02.2026

Викладено матеріали учасників XI Міжнародної наукової конференції «Технології, інструменти та стратегії реалізації наукових досліджень», яка відбулася 6 лютого 2026 року у місті Чернівці.

УДК 082:001

© Колектив учасників конференції, 2026

© ГО «Міжнародний центр наукових досліджень», 2026

ISBN 978-617-8582-16-6

© ТОВ «УКРЛОГОС Груп», 2026

СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО ОЦІНКИ ТОКСИЧНОСТІ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ

Ворожко Поліна Романівна

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

Вступ. Створення нових лікарських засобів є складним процесом, у якому токсикологічний скринінг відіграє вирішальну роль. Головною метою доклінічної оцінки безпеки є ідентифікація потенційних загроз для здоров'я людини ще до початку клінічних випробувань, адже це є необхідною умовою прогнозування побічних ефектів і визначення терапевтичного індексу. Водночас у сучасних умовах поняття безпеки значно розширилося: невід'ємною частиною розробки лікарських засобів стала оцінка екологічного ризику (Environmental Risk Assessment), оскільки активні фармацевтичні інгредієнти можуть впливати на живі організми у довкіллі навіть у низьких концентраціях [1].

Основна частина. Традиційно оцінку токсичності поділяють на гостру, підгостру та хронічну. Критичним етапом для препаратів тривалого застосування є дослідження хронічної токсичності, що дозволяє виявити кумулятивні ефекти. У контексті екотоксикології «золотим стандартом» вважаються ракоподібні *Daphnia magna* завдяки їх високій чутливості та важливій ролі у трофічних ланцюгах [2]. Для стандартизації таких досліджень застосовується методика OECD Test No. 211, у якій ключовим показником є репродуктивний потенціал організму.

Водночас експериментальні методи *in vivo* мають суттєві обмеження: вони є вартісними, тривалими та пов'язані з етичними питаннями використання тварин. Це зумовило стратегічний перехід до методів *in silico*, зокрема QSAR-моделювання (Quantitative Structure–Activity Relationship). Методологія QSAR базується на фундаментальній аксіомі, згідно з якою біологічна активність сполуки є функцією її хімічної

структури, що дозволяє прогнозувати властивості нових молекул ще до їх синтезу. Такий підхід повністю відповідає міжнародним принципам 3R (Replacement, Reduction, Refinement). Побудова QSAR-моделей є багатоетапним процесом, який включає збір даних, розрахунок молекулярних дескрипторів (від простих 1D до складних 3D) та відбір змінних [3].

Незважаючи на успіхи у прогнозуванні гострої токсичності, моделювання хронічної токсичності залишається одним із найбільш проблемних напрямів через складність механізмів дії та дефіцит якісних експериментальних даних для навчання моделей. Перспективним шляхом вирішення цієї проблеми є використання глобальних баз даних, зокрема ECOTOX Knowledgebase, у поєднанні із сучасними обчислювальними платформами.

Висновки. Сучасні підходи до оцінки токсичності лікарських засобів формують гібридну систему, що поєднує класичні біологічні тести (зокрема на *Daphnia magna*) та передові комп'ютерні технології.

Список використаних джерел:

1. Parasuraman S. Toxicological screening. *Journal of Pharmacology and Pharmacotherapeutics*. 2011. Vol. 2(2). P. 74–79.
2. Tkaczyk A., Bownik A., Dudka J., Kowal K. *Daphnia magna* model in the toxicity assessment of pharmaceuticals: A review. *Science of The Total Environment*. 2021. Vol. 763. 143038.
3. Pushkarova, Yaroslava, and Raim Izmailov. «QSPR Prediction of Aqueous Solubility of Organic Compounds: Active Pharmaceutical Ingredients and Excipients.» *2025 15th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT)*. IEEE, 2025.