

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

З МАТЕРІАЛАМИ X МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

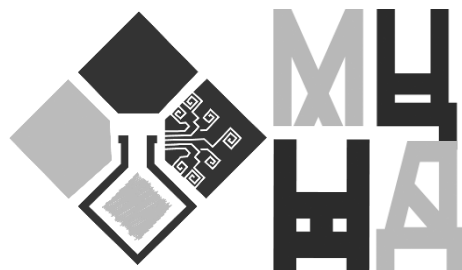
26 ГРУДНЯ 2025 РІК

М. ЛУЦЬК, УКРАЇНА

**«ТРАДИЦІЙНІ ТА ІННОВАЦІЙНІ
ПІДХОДИ ДО НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ»**



ЗБІРНИК НАУКОВИХ
ПРАЦЬ З МАТЕРІАЛАМИ
Х МІЖНАРОДНОЇ
НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ



ТРАДИЦІЙНІ ТА ІННОВАЦІЙНІ ПІДХОДИ ДО НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

| 26 грудня 2025 рік
м. Луцьк, 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: Білоус Т.В.

Дизайн: Бондаренко І.В.

Рекомендовано до видання Вченою Радою Інституту науково-технічної інтеграції та співпраці. Протокол № 51 від 25.12.2025 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 № 505 від 10.06.2025**).

Збірник наукових праць з матеріалами конференції видано офіційно суб'єктом видавничої справи зі **Свідоцтвом 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 65 **Традиційні та інноваційні підходи до наукових досліджень:**
збірник наукових праць з матеріалами X Міжнародної наукової конференції, м. Луцьк, 26 грудня, 2025 р. / Міжнародний центр наукових досліджень. — Вінниця: ТОВ «УКРЛОГОС Груп, 2025. — 586 с.

ISBN 978-617-8582-10-4

DOI 10.62731/mcnd-26.12.2025

Викладено матеріали учасників X Міжнародної наукової конференції «Традиційні та інноваційні підходи до наукових досліджень», яка відбулася 26 грудня 2025 року у місті Луцьк.

УДК 082:001

© Колектив учасників конференції, 2025

© ГО «Міжнародний центр наукових досліджень», 2025

ISBN 978-617-8582-10-4

© ТОВ «УКРЛОГОС Груп», 2025

СЕКЦІЯ XXVI. ФАРМАЦІЯ ТА ФАРМАКОТЕРАПІЯ

QSPR-МОДЕЛЮВАННЯ КОНСТАНТ ДИСОЦІАЦІЇ АКТИВНИХ ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ІНГРЕДІЄНТІВ

Гавриляк Валерія Олегівна

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

У процесі сучасної фармацевтичної розробки значна увага приділяється дослідженню фізико-хімічних властивостей активних фармацевтичних інгредієнтів (АФІ), зокрема їх кислотно-основної поведінки. Розуміння характеристик дисоціації сполук є визначальним чинником при оптимізації складу та властивостей лікарських форм. Важливим параметром, що описує іонізаційні властивості молекул у розчині, є константа дисоціації (pK_a). Оскільки експериментальне визначення значень pK_a потребує значних часових і матеріальних витрат, актуальним є застосування обчислювальних методів їх прогнозування. Одним із таких підходів є QSPR-моделювання, що базується на встановленні кількісних залежностей між молекулярною структурою сполук та їх фізико-хімічними властивостями [1].

Мета дослідження – розробити QSPR модель, що дозволяє прогнозувати константи дисоціації активних фармацевтичних інгредієнтів на основі їх хімічної структури.

Програмне забезпечення – Matlab R2025b (trial license).

Для проведення дослідження було обрано 59 АФІ, що відрізняються за своєю хімічною структурою та кислотно-основними властивостями. Експериментальні значення pK_a отримані з наукової літератури [2].

Проведено системний розрахунок молекулярних дескрипторів, що відображають структурні, електронні, топологічні та фрагментні

характеристики досліджуваних АФІ, із використанням наборів BlueDesc Descriptor та RDKit Descriptor (всього 370 дескрипторів). З метою підвищення інформативності моделювання здійснено поетапний статистичний відбір дескрипторів на основі коефіцієнта детермінації з експериментальними значеннями pK_a та аналізу мультиколінеарності, що дозволило сформувавши оптимальний набір незалежних змінних. На основі відібраних дескрипторів у середовищі MATLAB було побудовано QSPR-модель, що продемонструвала високий рівень узгодженості між експериментальними та розрахованими значеннями pK_a для навчальної ($R^2 = 0,87$) та тестової вибірок ($R^2 = 0,91$).

Висновки. У середовищі MATLAB була побудована QSPR-модель, що кількісно описує залежність між експериментальними значеннями pK_a та чотирма молекулярними характеристиками: одним топологічним дескриптором, двома електронними дескрипторами та кількістю карбоксильних груп. Застосування моделі до незалежної тестової вибірки підтвердило її високу прогностичну здатність, що свідчить про адекватність побудованої моделі та відсутність суттєвого перенавчання. Отримані результати підтверджують ефективність використаного підходу для прогнозування кислотно-основних властивостей активних фармацевтичних інгредієнтів.

Список використаних джерел:

1. Pushkarova, Y., & Izmailov, R. (2025, September). QSPR Prediction of Aqueous Solubility of Organic Compounds: Active Pharmaceutical Ingredients and Excipients. In *2025 15th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT)* (pp. 232-235). IEEE.
2. Mercader, A. G., Goodarzi, M., Duchowicz, P. R., Fernández, F. M., & Castro, E. A. (2010). Predictive QSPR study of the dissociation constants of diverse pharmaceutical compounds. *Chemical Biology & Drug Design*, 76(5), 433-440.