

Non-governmental Organization
International Center of Scientific Research



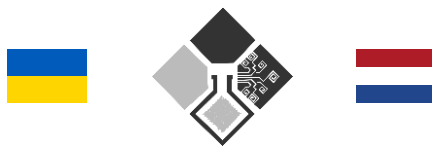
PROCEEDINGS OF THE IX INTERNATIONAL SCIENTIFIC AND THEORETICAL CONFERENCE

ADVANCED DISCOVERIES
OF MODERN SCIENCE:
EXPERIENCE, APPROACHES
AND INNOVATIONS

26.12.2025

AMSTERDAM
THE NETHERLANDS

SCIENTIA
COLLECTION OF SCIENTIFIC PAPERS



Non-governmental Organization
International Center of Scientific Research

SCIENTIA
COLLECTION OF SCIENTIFIC PAPERS

with the proceedings of the
IX International Scientific and Theoretical Conference

Advanced Discoveries of Modern Science: Experience, Approaches and Innovations

 December 26, 2025

 Amsterdam; The Netherlands

Hosted by an authorized Crossref member with the support of the
Institute of Scientific and Technical Integration and Cooperation

Published online by Primedia E-launch LLC (USA)
Published in print by LLC UKRLOGOS Group (Ukraine)

✓ ISO 2108:2005 ✓ ISO 1086:1991 ✓ ISO 7275:1985

Amsterdam, 2025

UDC 082:001
A 20



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 № 504 dated June 10th, 2025).

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

Chairman of the Organizing Committee:
Miriam Goldenblat
International Center of Scientific Research, Ukraine

Book layout designer:
Gabriela Torres
Primedia E-launch LLC, USA

Responsible editor:
Tetiana Bilous
UKRLOGOS Group Ltd., Ukraine

A 20 Advanced discoveries of modern science: experience, approaches and innovations: Collection of Scientific Papers «SCIENTIA» with Proceedings of the IX International Scientific and Theoretical Conference, December 26, 2025. Amsterdam, The Netherlands: International Center of Scientific Research.

ISBN 979-8-88955-771-5 (series)

DOI 10.36074/scientia-26.12.2025 

This collection presents the proceedings of the scientific conference, bringing together research papers on a wide range of contemporary academic topics. The volume highlights diverse perspectives, innovative approaches, and practical findings that reflect the current trends and challenges in global science and education. This collection is intended for students, postgraduate and doctoral candidates, educators, researchers, and professionals from diverse disciplines.

 Bowker.
BOOKWIRE



Conference proceedings are presented in **Google Books** and **Bookwire™** by **Bowker**, ensuring international availability.

UDC 082:001

ISBN 979-8-88955-771-5

© Participants of the conference, authors, 2025
© NGO International Center of Scientific Research, 2025

www.previous.scientia.report

SECTION 22.

PHARMACY AND PHARMACOTHERAPY

Зеленко Юлія Юріївна

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-МОДЕЛЮВАННЯ ОБ'ЄМУ РОЗПОДІЛУ АКТИВНИХ ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ІНГРЕДІЄНТІВ

Коректне визначення фармакокінетичних параметрів, зокрема об'єму розподілу, є надзвичайно важливим етапом у процесі розробки та використання лікарських препаратів. Об'єм розподілу відображає простір в організмі, у якому поширюється лікарська речовина, і безпосередньо впливає на ефективність і безпеку терапії. Традиційні методи експериментального визначення цього параметра часто є витратними за часом і ресурсами, а також передбачають проведення клінічних досліджень, що ускладнює ранні стадії розробки нових ліків.

Сучасні інформаційні технології відкривають перспективи для оперативного та точного прогнозування об'єму розподілу без необхідності масштабних експериментальних досліджень. Зокрема, методи QSPR моделювання дають змогу використовувати хімічні характеристики молекул для передбачення їх фармакокінетичних властивостей. Такий підхід значно пришвидшує відбір перспективних кандидатів, знижує витрати на дослідження та підвищує ефективність процесу фармацевтичної розробки [1].

Метою даного дослідження було створення комп'ютерної моделі, здатної прогнозувати об'єм розподілу активних фармацевтичних інгредієнтів на основі їх молекулярної структури. Експериментальні значення об'єму розподілу отримані з наукової літератури [2].

Розроблена QSPR-модель базується на молекулярних дескрипторах, початковий набір яких включав 502 структурні параметри. Застосування послідовного статистичного відбору з урахуванням інформативності та

кореляційної незалежності дозволило зменшити надлишковість змінних та підвищити стабільність моделі.

До фінального рівняння моделі увійшли чотири молекулярні дескриптори, які належать до різних категорій і відображають важливі структурно-фізико-хімічні властивості молекул, а саме: електростатичний параметр, що описує розподіл негативно зарядженої поверхні; дескриптор відносної гідрофобності, що характеризує співвідношення гідрофобної і полярної площі молекули; геометричний дескриптор, що описує радіальну функцію розподілу електронної густини; а також тривимірний електронно-топологічний параметр, чутливий до просторового розміщення атомів та їх електронних властивостей.

Висновки. Отримана модель продемонструвала високий рівень відповідності між прогнозованими та експериментальними значеннями об'єму розподілу у навчальній вибірці, що підтверджується значенням коефіцієнта детермінації. Перевірка на незалежній тестовій вибірці підтвердила збереження точності прогнозів та відсутність ознак перенавчання.

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. Ghafourian, T., Barzegar-Jalali, M., Dastmalchi, S., Khavari-Khorasani, T., Hakimiha, N., & Nokhodchi, A. (2006). QSPR models for the prediction of apparent volume of distribution. *International journal of pharmaceutics*, 319(1-2), 82-97.