

окремих засобів, з якою фармацевт зобов'язаний ознайомити пацієнта у ході фармацевтичної опіки.

**Висновки.** У повсякденній професійній діяльності фармацевт використовує велику кількість нормативних документів, що регламентують обіг антисептичних засобів. Це обумовлено відсутністю єдиного реєстру антисептиків, широким асортиментом діючих речовин та форм випуску, особливостями фармацевтичної опіки при відпуску окремих засобів.

## ФАРМАКОЛОГІЧНИЙ ПОТЕНЦІЛ НОВИХ ПОХІДНИХ 3-МЕТИЛКСАНТИНУ ТА 1,2,4-ТРИАЗОЛУ

<sup>1</sup>Трофімова Т. С., <sup>2</sup>Гоцуля А. С.

<sup>1</sup>Національний медичний університет ім. О. О. Богомольця,  
02000, проспект Перемоги, 34, м. Київ, Україна,

<sup>2</sup>Запорізький державний медико-фармацевтичний університет,  
69035, проспект Маяковського, 26, м. Запоріжжя, Україна,  
[ostroff@ukr.net](mailto:ostroff@ukr.net), [andrey.goculya@gmail.com](mailto:andrey.goculya@gmail.com)

**Актуальність.** Розробка нової біологічно активної субстанції – складний та тривалий процес, який передбачає залучення величезної кількості ресурсів. Визначення вірної стратегії пошуку активних молекул дозволяє ефективно проводити дослідження у даному напрямку. Серед значного спектра методів створення перспективної біоактивної субстанції метод удосконалення привілейованих структур є одним з найбільш практично значимих. Використання гібрид-фармакофорного підходу додатково посилює можливості у створенні цільового вискоефективного продукту. Як приклад можна навести поєднання похідних ксантину та 1,2,4-триазолу в межах однієї молекули.

**Мета дослідження.** Спрямований *in silico* дизайн ряду сполук, які поєднують фрагменти 3-метилксантину та 1,2,4-триазолу з наступною предиктивною оцінкою їх фармакокінетичного та фармакодинамічного профілю.

**Матеріали та методи.** Дизайн цільової групи сполук у вигляді S-алкілпохідних 7-((3-меркапто-4-метил-1,2,4-триазол-5-іл)метил)-3-метилксантину ґрунтувався на класичній методології органічної хімії. Молекулярний докінг (AutoDock 4.2.6, Open Vabel 3.1.1, MGL Tools-1.5.6, BIOVIA) дозволив визначити значення енергії

зв'язування, конформаційне розташування ліганду в активному центрі модельного ферменту (циклооксигеназа-2, ланостерол-14 $\alpha$ -деметилаза, анапластичної лімфоми кіназа), а також природу амінокислотних залишків і тип взаємодії. Використання онлайн-платформи SwissADME дозволило згенерувати ряд фізико-хімічних параметрів (розчинність у воді, молекулярну рефракцію і топологічну площину полярної поверхні), показників ліпофільності (iLOGP, XLOGP3, WLOGP, MLOGP, SILICOS-IT), фармакокінетики (абсорбція у шлунково-кишковому тракті, подолання епідермального бар'єра та інгібування ряду цитохромів).

**Результати.** Продемонстровано високі показники афінності сконструйованих лігандів до активних центрів циклооксигенази-2 та ланостерол-14 $\alpha$ -деметилази. Значно меншу вірогідність впливу дані речовини демонструють по відношенню до анапластичної лімфоми кінази. Виявлено, що більшість хімічних взаємодій мають гідрофобний характер за своєю природою. Серед залишків амінокислот у активних центрах ферментів домінує аліфатичний фрагмент. Далі в дослідженні було виконано передбачення загального фармакокінетичного профілю створених сполук, що було успішно виконано з використанням онлайн-платформи SwissADME. За наявними даними, молекулярна рефракція всіх розглянутих сполук розташована в діапазоні від 40 до 130, що відповідає необхідному критерію. Крім того, всі ці сполуки мають необхідне значення дескриптора топологічної площини полярної поверхні (TPSA), що визначає можливість подолання гематоенцефалічного бар'єра, знаходячись у діапазоні від 20 до 130 Å<sup>2</sup>. На основі середніх значень показників XLOGP3, WLOGP, MLOGP, SILICOS-IT, і iLOGP (Log Po/v), усі сполуки демонструють відповідний рівень ліпофільності, який відповідає необхідним вимогам. Більшість сполук успішно долають фільтри лікоподібності Ліпінського (Pfizer), Ghose (Amgen), Veber (GSK), Egan (Pharmacia) та Muegge (Bayer). Загалом, всі спроектовані структури характеризуються високою ймовірністю адсорбції в шлунково-кишковому тракті. Аналіз параметра log Kp (см/с) в діапазоні від -6,20 до -8,62 см/с вказує на обмежені можливості проникнення цих речовин через шкіру.

**Висновки.** Сучасними методами *in silico* досліджень здійснено визначення фармакологічного профілю S-алкілпохідних 7-((3-

меркапто-4-метил-1,2,4-триазол-5-іл)метил)-3-метилксантину, враховуючи фармакокінетичну та фармакодинамічну його складові, що попередньо демонструє значні перспективи для подальших досліджень цих сполук.

## **ОРГАНІЗАЦІЙНІ МОДЕЛІ ПІДРОЗДІЛІВ ГОСПІТАЛЬНОЇ ОЦІНКИ МЕДИЧНИХ ТЕХНОЛОГІЙ**

**Філінюк О.М., Бабенко М.М., Косяченко К.Л.**

Національний медичний університет імені О.О. Богомольця, 01004,  
вул. Є. Чикаленка, 22, м. Київ, Україна,  
[olenafilinyuk@gmail.com](mailto:olenafilinyuk@gmail.com), [babenko.mi@gmail.com](mailto:babenko.mi@gmail.com),  
[kosleokos@gmail.com](mailto:kosleokos@gmail.com)

**Актуальність.** В 2021 році Україна почала запроваджувати госпітальну оцінку медичних технологій (ОМТ). За цей період були адаптовані глобальні інструменти госпітальної ОМТ до українських реалій, розроблена методологія тренінгу з госпітальної ОМТ, проведена апробація програми тренінгу на базі КНП «Обласна клінічна лікарня імені О.Ф. Горбачевського» Житомирської обласної ради, розроблено та затверджено курс тематичного удосконалення з госпітальної ОМТ в НМУ імені О.О. Богомольця для зацікавлених осіб лікарняних закладів.

З вересня 2022 року по березень 2023 року було проведено дослідження щодо визначення поточних підходів впровадження нових медичних технологій на рівні лікарняних закладів. У дослідженні взяли участь 28 респондентів із 3 лікарняних закладів різного рівня та різних регіонів України. В результаті дослідження було виявлено, що, незважаючи на схожі підходи до прийняття рішень щодо впровадження нових медичних технологій, існують відмінності, які сформувалися завдяки специфіці організаційних структур лікарняних закладів та адміністративним, підпорядкуванням.

Саме тому при впровадженні госпітальної ОМТ лікарняний заклад має вибрати організаційну модель госпітальної ОМТ, яка буде відповідати його стратегіям.

**Мета дослідження.** Аналіз існуючих організаційних моделей підрозділів госпітальної ОМТ у світі.