



III Міжнародна науково-практична  
інтернет-конференція

# ПРОБЛЕМИ ТА ДОСЯГНЕННЯ СУЧАСНОЇ БІОТЕХНОЛОГІЇ

24 березня 2023 р.  
м. Харків, Україна

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
КАФЕДРА БІОТЕХНОЛОГІЇ**

**MINISTRY OF HEALTH OF UKRAINE  
NATIONAL UNIVERSITY OF PHARMACY  
DEPARTMENT OF BIOTECHNOLOGY**

**ПРОБЛЕМИ ТА ДОСЯГНЕННЯ  
СУЧАСНОЇ БІОТЕХНОЛОГІЇ**

**PROBLEMS AND ACHIEVEMENTS  
OF MODERN BIOTECHNOLOGY**

**Матеріали  
III міжнародної науково-практичної  
Інтернет-конференції**

**Materials  
of the III International Scientific and Practical  
Internet Conference**

**ХАРКІВ  
KHARKIV  
2023**

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
КАФЕДРА БІОТЕХНОЛОГІЇ

**ПРОБЛЕМИ ТА ДОСЯГНЕННЯ  
СУЧАСНОЇ БІОТЕХНОЛОГІЇ**

**Матеріали  
III міжнародної науково-практичної  
Інтернет-конференції**

**24 березня 2023 року  
Харків**

**Редакційна колегія:** проф. Котвіцька А. А., проф. Владимірова І. М., проф. Хохленкова Н.В., доц. Калюжная О.С., доц. Двінських Н.В.

С 89 Проблеми та досягнення сучасної біотехнології: матеріали III міжнародної наук.-практ. інтернет-конф. (24 березня 2023 р., м. Харків). – Електрон. дані. – Х. : НФаУ, 2023. – 443 с. – Назва з тит. екрана.

Збірка містить матеріали науково-практичної конференції, тематика якої охоплює такі напрями: фармацевтична та медична біотехнологія, перспективні біологічно активні речовини, харчова біотехнологія, продукти здорового харчування, екологічна біотехнологія, природоохоронні технології, біотехнологія у рослинництві, тваринництві та ветеринарії, сучасні біотехнології для народного господарства, розробка, виробництво, забезпечення та контроль якості лікарських засобів, мікробіологічні дослідження на етапах розробки, виробництва та контролі якості харчових продуктів, ветеринарних та лікарських препаратів, організаційно-економічні аспекти діяльності біотехнологічних та фармацевтичних підприємств у сучасних умовах, маркетингові дослідження у біотехнології та фармації, теорія та практика підготовки здобувачів вищої освіти спеціальності «Біотехнології та біоінженерія».

Для широкого кола науковців, магістрантів, аспірантів, докторантів, співробітників біотехнологічних та фармацевтичних підприємств та фірм, викладачів вищих навчальних закладів наукових і практичних працівників фармації та медицини.

Автори опублікованих матеріалів несуть повну відповідальність за підбір, точність наведених фактів, цитат, економіко-статистичних даних, власних імен та інших відомостей. Матеріали подаються мовою оригіналу.

## **Розробка складу лікарських засобів з ЛРС з використанням розрахунку критеріїв «лікоподібності» БАР екстрактів за допомогою програмного забезпечення Molinspiration**

<sup>1</sup> Борисюк І.Ю., <sup>1</sup> Табал Іман, <sup>1</sup> Молодан Ю.О., <sup>2</sup> Валіводзь І.П.

<sup>1</sup>Кафедра технології ліків Одеського національного медичного університету,  
м. Одеса, Україна

<sup>2</sup>Лабораторія фізико-хімічної фармакології Фізико-хімічного інституту  
ім. О. В. Богатського НАНУ, м. Одеса, Україна  
valivodzirina@gmail.com

З літературних джерел нам відомо, що фармакологічна активність лікарських рослин обумовлена сумою та синергічною дією біологічно активних сполук, при цьому різні групи біологічно активних речовин можуть володіти різними видами фармакологічної активності. Тому виявлення тих груп БАР, які вносять найвагомійший вклад у прояв активності, залишається актуальним завданням як з наукової, так і з практичної точки зору. Дослідження *in silico* важливим не лише для розуміння механізмів дії БАР, але і для коректної стандартизації одержаних субстанцій або фітотерапевтичних лікарських засобів.

Складність в проведенні досліджень за теперішніх умов, висока вартість та тривалість цього процесу вимагають розробки нових теоретичних основ для пошуку нових лікарських засобів, проте останнім часом існують різні можливості для здійснення досліджень у даній галузі. І вибір методу прогнозування доцільно проводити саме в рамках дистанційної роботи з використанням комп'ютерного моделювання.

Результати визначення критеріїв «лікоподібності» БАР досліджуваних екстрактів наведено у табл. 1. За результатами прогнозу, більшість БАР одержаних екстрактів відповідали правилам «drug-like» К. Ліпінського. Деякі сполуки відповідали критеріям «drug-like» не за всіма показниками, що можна пояснити їх хімічною структурою, вони є перспективними БАР для розробки

лікарських засобів різного спектру дії, а й попри зазначене – протисудомної, протиопікової, заспокійливої, протизапальної.

Таблиця 1. Результати визначення критеріїв «лікоподібності» деяких БАР досліджуваних екстрактів

Сполука	Критерії «Drug-like»					
	коефіцієнт розподілу (Log P)	молекулярна рефракція (полярна поверхня) (Å <sup>2</sup> )	Молекулярна маса (М.м.)	кількість акцепторів водневого зв'язку (На)	кількість донорів водневого зв'язку (Нд)	кількість нетермінальних зв'язків (Rot B)
Тимол	3,34	20,23	150,22	1	1	1
Рутин	-0,36	210,50	464,38	12	8	4
Кверцетин	1,68	131,35	302,24	7	5	1
Гіперозид	-0,36	210,50	464,38	12	8	4
Борнеол	2,35	20,23	154,25	1	1	0
Карвакрол	3,81	20,23	150,22	1	1	1
Цимол	3,90	-	3,90	0	0	1
Ліналоол	3,21	20,23	154,25	1	1	4
Пальмітинова кислота	7,06	37,30	256,43	2	1	14
Олеїнова кислота	7,58	37,30	282,47	2	1	15
Евгенол	2,10	29,46	164,20	2	1	3
Ізовалеріанова кислота	1,21	37,30	102,13	2	1	2
Саліцилова кислота	1,87	57,53	138,12	3	2	1
Критерії К. Ліпінського	≤ 5	-	≤ 500	≤ 10	≤ 5	≤ 10

Проаналізовано та систематизовано літературні дані щодо об'єктів дослідження: чебрецю повзучого (*Thymus serpyllum* L.) та коріандру посівного (*Coriandrum sativum* L.), як перспективних рослин для розробки нового лікарського засобу з протисудомною активністю; трава хвоща польового (*Herba Equiseti arvensis*) та трава звіробою звичайного (*Herba Hyperici perforati*), БАР якої володіють протизапальною активністю; материнка звичайна (*Origanum vulgare* L.) та кипрей вузьколистий (*Chamaenerion angustifolium* L.), як перспективних рослин для розробки нових лікарських засобів з анксиолітичною активністю.