

PLANTA+

НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА

SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION

28-29 січня 2025 р.
м. Київ, Україна

January 28-29, 2025
Kyiv, Ukraine

Том 2
Volume 2

20
25



МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ О.О. БОГОМОЛЬЦЯ
ІНСТИТУТ БОТАНІКИ ІМ. М.Г. ХОЛОДНОГО НАН УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

«PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА»

Матеріали

**V Науково-практичної конференції з міжнародною участю,
присвяченої пам'яті доктора хімічних наук,
професорки Ніни Павлівни Максютіної
(до 100-річчя від дня народження)**

Том 2

**28-29 січня 2025 року
м. Київ**

MINISTRY OF HEALTH OF UKRAINE
MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE
BOGOMOLET'S NATIONAL MEDICAL UNIVERSITY
M.G. KHOLODNY INSTITUTE OF BOTANY
NATIONAL UNIVERSITY OF PHARMACY

«PLANTA+. SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION»

**The proceedings
of the Fifth Scientific and Practical Conference with International
Participation, dedicated to the memory of Doctor of Chemistry
Professor Nina Pavlivna Maksyutina
(on her 100th birthday)**

Volume 2

**28-29 January 2025
Kyiv**

УДК 615.322.03:001.891](477+100)(082)

P71

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ

Мінарченко В. М., доктор біологічних наук, професор

Карпюк У. В., доктор фармацевтичних наук, професор

Махиня Л. М., кандидат біологічних наук, доцент

Підченко В. Т., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Чолак І. С., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Ковальська Н. П., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Ольшанський І.Г., кандидат біологічних наук

P71 PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА: матеріали V науково-практичної конференції з міжнародною участю, присвяченої пам'яті доктора хімічних наук, професорки Ніни Павлівни Максютіної (до 100-річчя від дня народження) (Київ, 28-29 січня 2025 р.). Київ : Паливода А. В., 2025. Т.2. 302 с.

ISBN 978-966-437-807-6 (Повне зібрання)

ISBN 978-966-437-784-0 (Том 2)

Збірник містить матеріали V науково-практичної конференції з міжнародною участю, присвяченої пам'яті доктора хімічних наук, професорки Ніни Павлівни Максютіної (до 100-річчя від дня народження) «PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА». У збірнику опубліковано результати наукових досліджень провідних вчених України та іноземних фахівців з питань фітохімічного аналізу, стандартизації лікарської рослинної сировини, інтродукції, ресурсознавства лікарських рослин. висвітлено питання технології та аналізу лікарських засобів рослинного походження, дієтичних добавок, лікувально-профілактичних та косметичних засобів. представлені фармакологічні дослідження з питань безпечності та застосування у клінічній практиці лікарських засобів рослинного походження. Розглянуто проблеми модернізації навчального процесу та орієнтації на дистанційне навчання у закладах освіти.

Матеріали представляють інтерес і можуть бути корисними для широкого кола наукових та науково-педагогічних працівників наукових установ, закладів вищої освіти фармацевтичного, медичного, біологічного профілю, докторантів, аспірантів, студентів, співробітників фармацевтичних підприємств та громадських організацій.

Друкується в авторській редакції. відповідальність за достовірність наданого для видання матеріалу несуть автори одноосібно. будь-яке відтворення тексту без згоди авторів забороняється. матеріали пройшли антиплагіатну перевірку за допомогою програмного забезпечення strikeplagiarism.

ISBN 978-966-437-807-6 (Повне зібрання)

ISBN 978-966-437-784-0 (Том 2)

© Національний медичний університет
імені О. О. Богомольця, 2025

© Колектив авторів, 2025

ДОСЛІДЖЕННЯ ПОХІДНИХ N-ЗАМІЩЕНИХ СУКЦИНІМІДІВ З ФРАГМЕНТОМ МЕРКАПТОБЕНЗОЙНОЇ КИСЛОТИ *IN SILICO*

Герасименко А.П., Вельчинська О.В.

Національний медичний університет імені О.О. Богомольця

м. Київ, Україна

Nechipor7777@ukr.net, elena_wwu@ukr.net

Ключові слова: N-заміщені сукциніміди, меркаптобензойна кислота, комп'ютерне прогнозування, біомішені, скаффолд.

Вступ. Нові похідні N-заміщеного сукциніміду з фрагментом меркаптобензойної кислоти у складі молекули синтезовано шляхом взаємодії N-заміщених малеїнімідів з 2-меркаптобензойною кислотою. Молекули нових N-заміщених сукцинімідів містять малеїнімідний скаффолд з ароматичним фрагментом.

За допомогою досліджень *in silico* стає доступним прогнозування фізико-хімічних характеристик, фармакологічних властивостей та токсичності синтезованих сполук. Крім того, стає доступним розрахунок напрямку і рівню біологічної ефективності. За допомогою програми Swiss TargetPrediction нами виконано аналіз структури нових сполук з прогнозуванням їх властивостей та біомішеней, які раніше не описано в літературі [1].

Матеріали та методи. Комп'ютерний аналіз за програмою Swiss Target Prediction (SIB Swiss Institute of Bioinformatics), Swiss-ADME, Protox-II; розрахунковий метод.

Результати та їх обговорення. З метою дослідження взаємозв'язку «структура-активність» за допомогою програм Swiss TargetPrediction», Protox-II, Swiss-Prot проаналізовано особливості хімічної структури нових синтезованих похідних N-заміщених сукцинімідів з фрагментом меркаптобензойної кислоти. Виконано прогнозування фізичних, хімічних та біологічних властивостей нових сполук. Виконано аналіз потенційних біомішеней впливу сполук та їх токсичності: 6,7-24% – кінази, 15-26,7% – ензими тощо.

Висновки. За принципом гомології сполуки можуть розглядатися як потенційні антибіотики, кардіопротектори, нестероїдні протизапальні засіби, можуть мати антигепертензивну активність, анальгетичну дію, можуть бути ефективними для лікування інфекцій нирок та сечового міхура, а також панкреатиту

Перелік посилань:

1. N.D. Austin, N.V. Sahinidis, D.W. Trahan. Computer-aided molecular design: An introduction and review of tools, applications, and solution techniques. *Chem. Eng. Res. Design*. 2016. 116. P. 2-26

Вакуліч С.А., Афанасенко О.В. НОВІТНІ ПІДХОДИ ДО КОНТРОЛЮ ЯКОСТІ САПЛІМЕНТІВ, ЩО МІСТЯТЬ ХОЛЕКАЛЬЦИФЕРОЛ ТА МЕНАХІНОН	24
Ванега Д.О., Ніженковська І.В. КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ СУБСТАНЦІЇ ІЗОТРЕТИНОЇНУ МЕТОДОМ ВЕРХ	26
Верховець К.В., Брезіцька Н.В., Ніженковська І.В. ІНСТРУМЕНТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ СУБСТАНЦІЇ НУКЛЕОЗИДУ ЦИТИКОЛІНУ	27
Вихор О.О., Вельчинська О.В. СПЕКТРАЛЬНІ ТА ХРОМАТОГРАФІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ СУБСТАНЦІЇ ТАМСУЛОЗИНУ	28
Герасименко А.П., Вельчинська О.В. ДОСЛІДЖЕННЯ ПОХІДНИХ N-ЗАМІЩЕНИХ СУКЦИНІМІДІВ З ФРАГМЕНТОМ МЕРКАПТОБЕНЗОЙНОЇ КИСЛОТИ <i>IN SILICO</i>	29
Голінська В.О., Ніженковська І.В. КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ АКТИВНИХ ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ІНГРЕДІЄНІВ (АФІ) БАГАТОКОМПОНЕНТНОЇ СУМІШІ СУБСТАНЦІЙ МЕТОДОМ ВЕРХ	30
Гончаренко І.А., Вельчинська О.В. ІДЕНТИФІКАЦІЯ ПОХІДНИХ N-ФЕНІЛ ЗАМІЩЕНИХ СУКЦИНІМІДІВ З ФРАГМЕНТОМ МОЛЕКУЛИ 5-АМІНОУРАЦИЛУ ЗА ЇХ УФ-ТА ІЧ-СПЕКТРАМИ	31
Горяна С.В., Головченко О.І., Афанасенко О.В. РОЗРОБКА ПРОЄКТУ СПЕЦИФІКАЦІЇ ТА МЕТОДІВ КОНТРОЛЮ ЯКОСТІ ДЛЯ ЛІКУВАЛЬНОЇ КОСМЕТИКИ, ЩО МІСТИТЬ БЕТА- ГЛЮКАН ТА БІСАБОЛОЛ	32
Гринь Д.О., Гождзінський С.М. КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НІКЕТАМІДУ У ВОДНОМУ РОЗЧИНІ	34
Дуплій В.О., Рева Т.Д. ВИЗНАЧЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ МІНОКСИДИЛУ У ЛОСЬЙОНІ	35
Жилко А.О., Гождзінський С.М. КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЛЕВОМІЦЕТИНУ У СУБСТАНЦІЇ ТА ЛІКАРСЬКИХ ФОРМАХ	36
Зайцева Г.М., Попенко А.О. КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ АРГЕНТУМ ЦИТРАТУ У ДІЄТИЧНИХ ДОБАВКАХ СОРБЦІЙНО-АТОМНО-АБСОРБЦІЙНИМ МЕТОДОМ	37
Зайцева Г.М., Яровка І.О. КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЙОНІВ ЦИНКУ В ДІЄТИЧНИХ ДОБАВКАХ СОРБЦІЙНО-ФОТОМЕТРИЧНИМ МЕТОДОМ	39