

МІНІСТЕРСТВО
ОХОРОНИ
ЗДОРОВ'Я
УКРАЇНИ



МІНІСТЕРСТВО
ОСВІТИ І НАУКИ
УКРАЇНИ



ТОМ 2

20 лютого 2023 р.
м. Київ, Україна

НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА

PLANT +

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ О.О. БОГОМОЛЬЦЯ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ПРИВАТНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
“КИЇВСЬКИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ”
ІНСТИТУТ БОТАНІКИ ІМ. М.Г. ХОЛОДНОГО НАН УКРАЇНИ

«PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА»

Матеріали
IV Науково-практичної конференції з міжнародною участю,
до 20-річчя кафедри фармакогнозії та ботаніки
Національного медичного університету імені О.О. Богомольця

Том 2

20 лютого 2023 року

м. Київ

MINISTRY OF HEALTH OF UKRAINE
MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
BOGOMOLETS NATIONAL MEDICAL UNIVERSITY
NATIONAL UNIVERSITY OF PHARMACY
PRIVATE HIGHER EDUCATIONAL INSTITUTION
"KYIV MEDICAL UNIVERSITY"
M.G. KHOLODNY INSTITUTE OF BOTANY

«PLANTA+. SCIENCE, PRACTICE AND EDUCATION»

**The proceedings
of the Fourth Scientific and Practical Conference with International
Participation, dedicated to the 20th anniversary of Pharmacognosy
and Botany Department Bogomolets National Medical University**

Volume 2

20 February 2023

Kyiv

УДК 615.322.03(477+100)(082)

Р 71

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ

Мінарченко В. М., доктор біологічних наук, професор

Карпюк У. В., доктор фармацевтичних наук, професор

Бутко А. Ю., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Ємельянова О. І., кандидат медичних наук, доцент

Чолак І. С., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Махиня Л. М., кандидат біологічних наук, доцент

Струменська О. М., кандидат медичних наук, доцент

Підченко В. Т., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Ковальська Н. П., кандидат фармацевтичних наук, доцент

Ламазян Г. Р., кандидат фармацевтичних наук, доцент

PLANTA+. НАУКА, ПРАКТИКА ТА ОСВІТА: матеріали IV Науково-практичної конференції з міжнародною участю, до 20-річчя кафедри фармакогнозії та ботаніки Національного медичного університету імені О.О. Богомольця (Київ, 20 лютого 2023 р.). –Київ, 2023. Т. 2. 285 с.

ISBN 978-966-437-658-4 (повне зібрання)

ISBN 978-966-437-657-7 (Том 2)

Збірник містить матеріали IV Науково-практичної конференції з міжнародною участю, до 20-річчя кафедри фармакогнозії та ботаніки Національного медичного університету імені О.О. Богомольця «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 978-966-437-658-4 (повне зібрання)

ISBN 978-966-437-657-7 (Том 2)

© Національний медичний університет
імені О. О. Богомольця, 2023

© Колектив авторів, 2023

заготівель збільшився у 4 рази. Та варто пам'ятати, що природні запаси цілющих рослин не зможуть відновлюватись, якщо людина не потурбується про їх раціональне використання в природі [3]. Для раціонального використання, охорони та відновлення природних запасів лікарських рослин, все частіше ці види вирощують не лише на дослідних станціях, а й у ботанічних садах та дендропарках.

В період повномасштабного вторгнення Росії в Україну, зменшилося фінансування наукових установ, тому метою наших досліджень було запровадити економічно обґрунтоване альтернативне рішення - плантаційне вирощування лікарських рослин *ex situ* Національного дендрологічного парку «Софіївка» НАН України, на прикладі видів роду *Aquilegia* L.

Матеріали та методи. Експериментальні плантації для вирощування лікарських рослин були закладені на колекційних ділянках трав'янистих рослин Національного дендрологічного парку «Софіївка» НАН України (у 1, 2 й 3 кварталах), на площах від 10x10 м² до 40x40 м². Впродовж 2020-2022 років вивчення колекційних зразків здійснювалось за наступними ознаками: морфологічними, сезонним ритмом розвитку, стійкістю до хвороб і шкідників, насінневою продуктивністю, насінневим та вегетативним розмноженням. Обробку результатів експериментальних досліджень здійснювали за допомогою програми Microsoft Excel 10.0.

Результати та їх обговорення. Створення колекції видів роду *Aquilegia* у Національному дендрологічному парку «Софіївка» НАН України розпочато у 1994 р. [1]. На даний час колекція нараховує 4 види (*Aquilegia caerulea* E. James, *A. transsilvanica* Schur., *A. viridiflora* Pall., *A. vulgaris* L. та один сорт *A. hybrida* 'Spring magic mix'.

Посів насіння у відкритий ґрунт здійснюємо навесні (квітень-травень) та восени (вересень) свіжозібраним насінням, зібраним у поточному році, тому сходи виходять дружними (90% схожості). У перший рік після посіву цвітіння не спостерігається. Для високої декоративності генеративних особин відцвілі стебла необхідно зрізати до прикореневої розетки листків. В умовах культури ми ведемо контроль за самосівом, щоб уникнути перехресного запилення. Види роду *Aquilegia* не вимогливі до складу ґрунту, але його розпушування допомагає зберегти потрібну структуру і вологість ґрунту, а також позбавить бур'янів. Вегетативне розмноження (поділом куща) не використовуємо через те, що особини важко переносять таке втручання. Живцювання проводили лише для декоративного сорту *A. hybrida* 'Spring magic mix'. Ранньою весною обережно відламували від материнського куща молодий пагін, обробляли кореневіном і поміщали для вкорінення у пісок в умовах захищеного ґрунту. В кінці літа укорінені рослини висаджували на постійне місце. Щодо ураження хворобами та шкідниками, то впродовж досліджених років спостерігали борошнисту росу й павутинний кліщ. Постійний огляд рослин допомагає вчасно виявити хворобу на ранній стадії і знешкодити хімічними препаратами. У серпні й вересні збираємо насіння для наступного висіву.

Крім плантаційного вирощування видів роду *Aquilegia* досліджувані види мають декоративні якості. Низькорослі екземпляри використовують в якості

бордюрів і елементів альпійських гірок, високорослі сорти – у міксбортерах, поляни з декоративними злаками набувають різнобарв'я і особливу чарівність завдяки її присутності. Крім того, квіти зберігають форму і колір навіть в сухому вигляді і широко використовуються в композиціях з іншими сухоцвітами (*Ageratum houstonianum* Mill., *Helichrysum bracteatum* (Vent.) Haw., *Limonium sinuata*, *Lavandula angustifolia* subsp. *angustifolia* та ін.).

Згідно літературних даних, лікарською рослиною є *A. vulgaris*. Для виготовлення ліків використовують траву (*Herba Aquilegiae*), яку заготовляють під час цвітіння рослини, зрізуючи на висоті 8-10 см від поверхні ґрунту. У хімічному складі рослина *A. vulgaris* містить алкалоїди (0,008-0,054 %), ціаногенні сполуки й аскорбінову кислоту (у свіжому листі). Галенові препарати мають сечогінні, жовчогінні, потогінні, знеболюючі, заспокійливі, послаблюючі й антисептичні властивості. Препарати за участі *A. vulgaris* вживають при альгоменореї, імпотенції, шлункових коліках, кровотечах, жовтяниці різного походження, при застійних явищах у селезінці, печінці й жовчному міхурі, в разі початкової стадії водянки. Гарячим настоем трави полощуть ротову порожнину при запаленнях і норицях, лікують висипи на шкірі [2].

Висновки. Отже, *A. vulgaris* є основою для залучення нових зразків для вивчення хімічних і фармакологічних особливостей, з подальшим залученням до колекції лікарських рослин. А вирощування лікарських рослин у ботанічних садах і дендропарках дасть високий економічний ефект, закладаючи плантації лікарських рослин на вільних ділянках.

Перелік посилань:

1. Каталог рослин дендрологічного парку «Софіївка» кол. моногр. Умань, 2000. 160 с.
2. Лікарські рослини: енциклопедичний довідник: кол. моногр. Київ, 1989. 544 с.
3. Рідкісні, зникаючі та лікарські види рослин Львівщини. *Вісник позашиклля*. 2012. №11. 44 с.

QSAR-ДОСЛІДЖЕННЯ СУЛЬФУРВМІСНИХ ХІНАЗОЛІНІВ ЯК ПЕРСПЕКТИВНИХ АНТИОКСИДАНТІВ

Фам Ф. Х., Афанасенко О. В.

Національний медичний університет імені О.О. Богомольця; Київ, Україна
sashafam65@gmail.com, olgaaf77@gmail.com

Ключові слова: QSAR, хіназолін, SwissADME, антирадикальна активність, антиоксидантна активність

Вступ. Quantitative structure-activity relationship (QSAR) - це стратегія, яка має важливе значення для хімії та фармації, заснована на ідеї, що при зміні структури молекули, змінюється також її активність або властивість [1]. Вона полягає в синтезі та тестуванні ряду структурно споріднених речовин для

знаходження математичної залежності між двома параметрами: хімічною структурою та біологічною дією [1]. Сучасний QSAR-підхід в *in silico* дослідках використовує методологію обчислювальної хімії та машинного навчання, це дозволило хімікам пришвидшити в декілька разів пошук лікарських речовин [4]. Комп'ютерне моделювання зменшило потребу у синтезі великої кількості хімічних речовин та в проведенні безліч експериментальних досліджень, завдяки високо вірогідним прогнозам [3]. Дані взаємозв'язки лежать в основі цілеспрямованого синтезу, який дозволяє передбачити фармакокінетичні та фармакодинамічні параметри нових, ще не синтезованих молекул [3].

Як свідчать дані останніх десятиріч, загальний механізм різноманітних патологічних процесів пов'язаний з окислювальним стресом, включаючи нейродегенеративні захворювання [2]. Високе споживання кисню та ліпідна будова мозку робить його надзвичайно чутливим до перокисного окиснення ліпідів [2]. Патогенез нейродегенеративних захворювань залишається значною мірою невідомим на сьогодні, однак, дисбаланс антиоксидантного захисту та гіперпродукція активних форм кисню, як правило, присутні у таких пацієнтів, це дало підставу для подальшого вивчення та розробки ефективних антиоксидантів [2].

Матеріали та методи. Було досліджено сім сульфурвмісних похідних хіназоліну із лабораторними шифрами 4-SH-Quin, NKC-135, NKC-153, NKC-187, NKC-150, NKC-112, NC-109, які були синтезовані в Запорізькому державному медичному університеті. Розраховувались значення молекулярної рефракції, ліпофільності та розчинності у воді за допомогою веб-інструмента SwissADME, який включає різні методи обчислення. Результати ліпофільності та розчинності у воді представлені у логарифмічних величинах, а значення молекулярної рефракції не мають жодних систем одиниць.

Антирадикальну активність визначали *in vitro* методом відновлення стабільного вільного радикалу ДФПГ (2,2-дифеніл-1-пікрілгідразил), отриманні результати виражені у відсотках інгібування ДФПГ. Вірогідність залежності між експериментальними та теоретичними параметрами оцінювали *t*-критерієм Стьюдента (двобічним, парним) за допомогою комп'ютерної програми Microsoft Office Excel v2211 з надбудовою "Пакет аналізу". Для всіх видів аналізу досягнутий рівень значимості $p < 0,05$.

Результати та їх обговорення. У результаті ДФПГ-тесту S-похідні хіназоліну (4-SH-Quin, NKC-135, NKC-153, NKC-187, NKC-150, NKC-112, NC-109) виявили антирадикальну активність (табл. 1). Однаковий хіназоліновий каркас та наявність різних радикалів у різних місцях молекули пояснюють їхній ступінь біологічної активності, таким чином отримані результати ДФПГ-тесту порівнювались з теоретичними фізико-хімічними показниками для знаходження залежності один від одного.

Таблиця 1

Залежність між антирадикальною активністю та теоретичними значеннями ліпофільності, молекулярної рефракції та розчинності у воді сполук

Назва	Біологічна активність, %	Ліпофільність						Розчинність у воді			Молекулярна рефракція
		Log Po/w (iLOGP)	Log Po/w (XLOGP3)	Log Po/w (WLOGP)	Log Po/w (MLOGP)	Log Po/w (SILICOS-IT)	Consensus Log Po/w	Log S (ESOL)	Log S (Ali)	Log S (SILICOS-IT)	
4-SH-Quin	15.90	1.87	2.11	1.92	1.54	2.26	1.94	-2.85	-3.10	-3.43	46.79
NKC-135	15.70	1.50	2.07	1.81	1.16	1.71	1.65	-2.80	-3.56	-3.23	57.84
NKC-153	21.20	1.92	2.91	2.59	1.74	2.24	2.28	-3.38	-4.43	-3.66	67.45
NKC-187	22.20	2.13	3.34	2.83	2.01	2.44	2.55	-3.72	-4.87	-3.69	72.26
NKC-150	26.80	1.74	2.47	2.19	1.46	1.88	1.95	-3.11	-3.97	-3.25	62.64
NKC-112	33.30	1.86	1.97	2.20	1.46	2.05	1.91	-2.73	-3.45	-3.63	62.64
NC-109	90.10	2.27	3.88	3.60	2.59	3.79	3.23	-4.35	-5.01	-6.31	80.97
Кореляційний аналіз											
Коефіцієнт кореляції (R)		0.68	0.70	0.83	0.82	0.91	0.83	-0.77	-0.57	-0.97	0.73
Характеристика сили зв'язку		Помітна	Висока	Висока	Висока	Дуже висока	Висока	Висока	Помітна	Дуже висока	Висока
Рівень значимості (p)		0.02199	0.02316	0.02243	0.02077	0.02175	0.02200	0.01269	0.01151	0.01297	0.00505

У табл. 2 наведені результати розчинності у воді за допомогою методів: Log S (ESOL), Log S (Ali) та Log S (SILICOS-IT) (табл.2). Шкала відображення розчинності сполуки у воді для кожної моделі однакова: нерозчинний < -10 <