

# II

II ВСЕУКРАЇНСЬКА  
НАУКОВО-ПРАКТИЧНА  
КОНФЕРЕНЦІЯ

з міжнародною участю

# МІЖДИСЦИПЛІНАРНІ ПІДХОДИ ДО СТВОРЕННЯ ЛІКІВ

ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ  
за матеріалами конференції

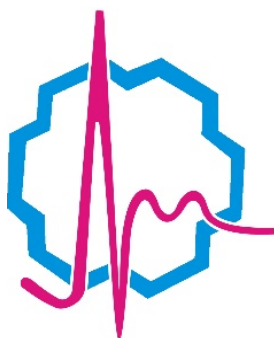
 14–15 квітня 2026 року

## ОРГАНІЗАТОРИ:

Міністерство освіти і науки України  
Міністерство охорони здоров'я України  
Національна академія наук України  
Одеський національний університет імені І. І. Мечникова  
Запорізький державний медико-фармацевтичний університет  
Фізико-хімічний інститут імені О. В. Богатського НАН України  
Координаційна рада з проблеми  
«Наукові основи створення лікарських препаратів»  
ТДВ «ІНТЕРХІМ»

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені І. І. МЕЧНИКОВА  
Факультет хімії та фармації  
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИКО-ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ФІЗИКО-ХІМІЧНИЙ ІНСТИТУТ ІМЕНІ О. В. БОГАТСЬКОГО НАН УКРАЇНИ  
КООРДИНАЦІЙНА РАДА З ПРОБЛЕМИ «НАУКОВІ ОСНОВИ СТВОРЕННЯ  
ЛІКАРСЬКИХ ПРЕПАРАТІВ»  
ТДВ «ІНТЕРХІМ»



**ІнтерХім**

## МІЖДИСЦИПЛІНАРНІ ПІДХОДИ ДО СТВОРЕННЯ ЛІКІВ

Збірник тез доповідей II Всеукраїнської науково-практичної  
конференції з міжнародною участю

Одеса, 14–15 квітня 2026 року

ОДЕСА  
ОНУ імені І. І. Мечникова  
2026

УДК 615.1/.3:615.012:061.3(043.2)

M58

*Рекомендовано вченою радою факультету хімії  
та фармації ОНУ імені І. І. Мечникова.  
Протокол № 2 від 21.10.2025 р.*

**M58** **Міждисциплінарні** підходи до створення ліків [Електронний ресурс] : зб. тез доп. II Всеукр. наук.-практ. конф. з міжнар. участю (Одеса, 14–15 квіт. 2026 р.) / за ред. О. О. Нефьодова, В. В. Менчука, Л. А. Расколи, А. О. Цісак. Електронні текстові дані (1 файл : 8,1 МБ). Одеса : ОНУ імені І. І. Мечникова, 2026. 486 с.

ISBN 978-966-186-407-7

У збірнику тез доповідей II Всеукраїнської науково-практичної конференції з міжнародною участю «Міждисциплінарні підходи до створення ліків» обговорено роль інформаційних технологій в створенні та впровадженні в медичну практику лікарських засобів, сучасні підходи до синтезу інноваційних лікарських препаратів, фармацевтичний аналіз, стандартизацію та контроль якості лікарських препаратів, актуальні проблеми доклінічного та клінічного вивчення лікарських засобів, а також особливості здійснення управлінсько-організаційних, маркетингових та соціально-економічних досліджень в фармацевтичній галузі та досвід і актуальні проблеми фармацевтичної освіти в умовах викликів сьогодення. Матеріали представлено в авторській редакції.

УДК 615.1/.3:615.012:061.3(043.2)

ISBN 978-966-186-407-7

© Автори статей, 2026

© Одеський національний університет  
імені І. І. Мечникова, 2026

## ЗМІСТ

ПРОГРАМА КОНФЕРЕНЦІЇ	16
ПЛЕНАРНЕ ЗАСІДАННЯ	18
ДОПОВІДІ ПРЕДСТАВЛЕНІ НА ПЛЕНАРНОМУ ЗАСІДАННІ	19
СТЕНДОВІ ДОПОВІДІ	21
ПРЕЗЕНТАЦІЯ ДОСВІДУ РОБОТИ КАФЕДРИ ЗАГАЛЬНОЇ ТА КЛІНІЧНОЇ ФАРМАЦІЇ	24
ПРАКТИКО-ОРІЄНТОВАНА ПІДГОТОВКА ФАРМАЦЕВТІВ: ДОСВІД КАФЕДРИ ЗАГАЛЬНОЇ ТА КЛІНІЧНОЇ ФАРМАЦІЇ ОДЕСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ імені І. І. МЕЧНИКОВА	41
Нефьодов О. О., Менчук В. В., Раскола Л. А., Сахарова Т. С., Цісак А. О., Александрова О. І., Радаєва І. М., Устянська О. В., Еберле Л. В., Богуцька О. Є., Грищук О. І.	

### **СЕКЦІЯ 1 Інформаційні технології в створені та впроваджені в медичну практику лікарських засобів**

МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДОКІНГ НОВИХ ВОДОРОЗЧИННИХ 1,4-БЕНЗОДІАЗЕПІНІВ ЯК ІНСТРУМЕНТ ОЦІНКИ ПОТЕНЦІЙНОЇ АНКСІОЛІТИЧНОЇ АКТИВНОСТІ	46
Літвінова В. Е., Сазонов К. Д., Шевченко О. В.	
SMART INHALER TECHNOLOGIES IN ASTHMA MANAGEMENT: ADDRESSING LOW ADHERENCE TO INHALED THERAPY	48
Maria Mihalachi-Anghel, Tatiana Rakovskaia, Nicolae Vacinschi	
ЦИФРОВІЗАЦІЯ ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ ГАЛУЗІ: ВІД РОЗРОБКИ ПРЕПАРАТУ ДО КЛІНІЧНОГО ЗАСТОСУВАННЯ	53
Бондарєв Є. В.	
НУКЛЕОФІЛЬНІ ТА ЕЛЕКТРОФІЛЬНІ ЦЕНТРИ СУЛЬФАМІНОВОЇ, АМІНОМЕТАНСУЛЬФОНОВОЇ КИСЛОТ ТА ТАУРИНУ: ТЕОРЕТИЧНИЙ АНАЛІЗ	55
Ковальов А. Ю., Кокшарова Т. В.	
СИСТЕМА ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ДЛЯ СТРУКТУРНО-КОНТЕКСТНОЇ ВАЛІДАЦІЇ ЛІКАРСЬКИХ ПРИЗНАЧЕНЬ З ОЦІНЮВАННЯМ РИЗИКІВ ПОЛІФАРМАЦІЇ	58
Кривенко Е. В., Назаркіна В. М.	
ПРОЛІКИ У ФАРМАЦЕВТИЧНІЙ РОЗРОБЦІ: МЕХАНІЗМИ БІОАКТИВАЦІЇ ТА ПІДВИЩЕННЯ БІОДОСТУПНОСТІ	61
Овчиннікова А. С., Слесарчук В. Ю., Завадська І. В.	
МЕТОДОЛОГІЧНІ АСПЕКТИ ІN SILICO СКРИНІНГУ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН ЯК АГОНІСТІВ ГАМК-РЕЦЕПТОРІВ	64
Цісак А. А., Еберле Л. В., Цісак А. О.	

### **СЕКЦІЯ 2 Сучасні підходи до синтезу інноваційних лікарських препаратів**

SYNTHESIS OF 6-PYRROLIDIN-1-YL-[1,3,5]TRIAZINE-2,4-DIAMINE DERIVATIVES WITH ANTIVIRAL, ANTIBACTERIAL, ANTITUBERCULOSIS ACTIVITY AND THEIR COMPLEXES WITH GRAPHENE QUANTUM DOTS	67
Anatolii Demchenko, Andrii Tsyhankov, Volodymyr Zaitsev	

5. Zhang, X., Han, Y., Huang, W., Jin, M., & Gao, Z. (2021). The influence of the gut microbiota on the bioavailability of oral drugs. *Acta pharmaceutica Sinica*. B, 11(7), 1789–1812. <https://doi.org/10.1016/j.apsb.2020.09.013>

## МЕТОДОЛОГІЧНІ АСПЕКТИ *IN SILICO* СКРИНІНГУ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН ЯК АГОНІСТІВ ГАМК-РЕЦЕПТОРІВ

А. А. Цісак, Л. В. Еберле, А. О. Цісак

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

**Вступ.** Розробка нових анксиолітичних засобів на основі природних сполук залишається пріоритетним напрямом сучасної фармації, зважаючи на необхідність мінімізації побічних ефектів синтетичних лігандів. ГАМК<sub>A</sub>-рецепторний комплекс є ключовою мішенню для модуляції гальмівних процесів у ЦНС [1]. Використання методів комп'ютерного моделювання (*in silico*) дозволяє трансформувати емпіричний пошук фітосполук у раціональний дизайн молекул із заданою афінністю [2].

**Мета роботи.** Обґрунтувати методологічний алгоритм віртуального скринінгу біологічно активних речовин (БАР) для ідентифікації потенційних агоністів ГАМК-рецепторів та оцінити їхній фармакокінетичний профіль.

**Методи дослідження.** Методологія базується на комплексному використанні молекулярного докінгу та системного структурного аналізу. Для моделювання було обрано кристалічну структуру людського ГАМК<sub>A</sub>-рецептора (PDB ID: 6HUO), що відповідає сучасному стандарту роздільної здатності для криоелектронної мікроскопії [3]. Підготовка бібліотеки лігандів включала геометричну оптимізацію структур у силовому полі MMFF94. Процедура докінгу проводилася з використанням алгоритмів оцінки вільної енергії зв'язування ( $\Delta G$ ) у бензодіазепіновому сайті. Прогнозування здатності сполук долати гематоенцефалічний бар'єр (ГЕБ) здійснювалося за допомогою інтегрованих ADMET-фільтрів [4].

**Результати.** Встановлено, що ключовим методологічним етапом є не лише розрахунок Scoring-функцій, а й якісний аналіз стабільності комплексів «рецептор-ліганд». Важливим аспектом є крос-валідація положення ліганда в активному центрі шляхом редокінгу референсних сполук [5]. Структурний аналіз дозволив виявити критичні амінокислотні залишки (зокрема His101, Ser205), відповідальні за стабілізацію комплексу. Фільтрація за параметрами ADMET підтвердила, що обрані структурні класи БАР мають високий

потенціал проникнення в ЦНС, що є критичним для анксиолітичної активності [4, 6].

**Висновки.** Запропонований методологічний підхід забезпечує високу точність пре-клінічної селекції БАР. Інтеграція сучасного програмного інструментарію та біоінформатичних баз даних створює фундамент для розробки селективних фітоанксиолітиків із покращеним профілем безпеки.

### Список літератури:

1. Indu Arora, Pankaj Mal, Poonam Arora, et al. GABAergic implications in anxiety and related disorders. *Biochem Biophys Res Commun*. 2024 p.: 724: 150218.doi: 10.1016/j.bbrc.2024.150218.
2. Pranali R. Bhujade, Khemutai G. Shedame, Pooja R. Hatwar, et al. A Review on Computer Aided Drug Design – In Silico. *Asian Journal of Pharmaceutical Research and Development*. 2024; 12(6): 80-85. <https://doi.org/10.22270/ajprd.v12i5.1467>
3. Khalid Abdullah Alaboudi, et al. In vitro and in silico pharmacological effects of Rosmarinus officinalis leaf methanolic extracts and essential oils. *Sci Rep*. 2025 Mar 28;15:10699. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-93504-5>
4. Asibur Rahman, et al. Evaluation of Antioxidant, Anxiolytic and Antidepressant Potential of Saurauia roxburghii Wall. Leaves: Supported by In vitro, In vivo, and In silico Approaches. *Phytomedicine Plus*. 2025. 5(24):100792. DOI:10.1016/j.phyplu.2025.100792
5. Stefano Forli, Ruth Huey, Michael E. Pique. Computational protein-ligand docking and virtual drug screening with the AutoDock suite. *Nat Protoc*. 2016 May ; 11(5): 905–919. doi:10.1038/nprot.2016.051.
6. David J Newman, Gordon M Cragg. Natural Products as Sources of New Drugs over the Nearly Four Decades from 01/1981 to 09/2019. *J Nat Prod*. 2020 Mar 27;83(3):770-803. doi: 10.1021/acs.jnatprod.9b01285.