



**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИКО-
ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

МАТЕРІАЛИ

**ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО- ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ З МІЖНАРОДНОЮ УЧАСТЮ
«ЗАПОРІЗЬКИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ
ФОРУМ - 2024»**

21-22 листопада 2024 року



Запоріжжя – 2024

ВІРТУАЛЬНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ПОШУКУ АНТИОКСИДАНТІВ: СКОРОЧЕННЯ ЧАСУ І РЕСУРСІВ

В.П. Риженко¹, Д.М. Хорощ²

*^{1,2}Запорізький державний медико-фармацевтичний університет (м. Запоріжжя)
ryzhenko@zsmu.edu.ua¹, khorosh.d.m@zsmu.edu.ua²*

Антиоксиданти відіграють ключову роль у захисті організму від окислювального стресу, який виникає через надмірну кількість вільних радикалів. Вільні радикали здатні пошкоджувати клітини, білки, ДНК і ліпіди, що призводить до розвитку багатьох захворювань, включаючи серцево-судинні, онкологічні, нейродегенеративні захворювання та передчасне старіння. Саме тому пошук ефективних антиоксидантів є важливим завданням сучасної науки. Сьогодні, з розвитком інформаційних технологій, ми можемо значно прискорити та полегшити процес пошуку нових сполук з антиоксидантною активністю. Використання комп'ютерних методів моделювання, баз даних хімічних сполук, а також алгоритмів машинного навчання дозволяє проводити цілеспрямований пошук потенційних антиоксидантів без необхідності витрат на дорогі й тривалі лабораторні дослідження.

Розвиток інформаційних технологій дозволяє здійснювати віртуальні дослідження, в яких аналізуються великі масиви даних, що значно підвищує ефективність процесу пошуку антиоксидантів. Серед ключових інструментів і методів можна виділити: Комп'ютерне моделювання та молекулярний докінг: цей метод дозволяє прогнозувати взаємодію молекул з певними біомішенями. Наприклад, ми можемо використовувати ці технології для оцінки того, як різні сполуки будуть взаємодіяти з вільними радикалами або іншими молекулами, що відповідають за окислювальні процеси. Молекулярний докінг допомагає обрати найбільш перспективні молекули для подальшого експериментального тестування. Великі дані (Big Data) і бази хімічних сполук: існують великі бази даних, які містять інформацію про тисячі хімічних речовин, їх властивості та біологічну активність. За допомогою алгоритмів аналізу великих даних ми можемо швидко ідентифікувати сполуки, що потенційно мають антиоксидантну активність, на основі їхньої хімічної структури та раніше проведених досліджень. Машинне навчання та штучний інтелект: алгоритми машинного навчання використовуються для прогнозування антиоксидантної активності нових речовин. Навчаючись на базі наявних даних, ці системи можуть запропонувати нові молекули, які з високою ймовірністю будуть ефективними антиоксидантами. Таким чином, ми можемо скоротити кількість необхідних експериментів і швидше знайти нові перспективні сполуки. Віртуальний скринінг: це процес, за допомогою якого мільйони сполук можуть бути протестовані на комп'ютері щодо їх здатності виступати антиоксидантами. Завдяки цьому ми можемо проводити масове тестування речовин без необхідності синтезу кожної з них у лабораторних умовах, що значно економить ресурси.

Використання новітніх інформаційних технологій у пошуку антиоксидантів має ряд переваг: Економія часу: процеси, які раніше займали роки лабораторних досліджень, зараз можуть бути виконані за лічені місяці або навіть тижні. Зниження витрат: комп'ютерне моделювання та віртуальні скринінги значно дешевші за експериментальні дослідження. Точність прогнозів: завдяки алгоритмам штучного інтелекту можна досягати більшої точності у відборі потенційних сполук.

Використання нових інформаційних технологій відкриває широкі можливості для цілеспрямованого пошуку нових антиоксидантів. Інструменти комп'ютерного моделювання, великі бази даних і штучний інтелект дозволяють прискорити процес відкриття нових біологічно активних речовин, що мають потенціал для використання в медицині, фармацевтиці та харчовій промисловості. Для успішного впровадження цих технологій необхідна тісна співпраця між біологами, хіміками та фахівцями в галузі інформаційних технологій.

ЩОДО ОПИСУ МОРФОЛОГІЧНИХ ТА АНАТОМІЧНИХ ОЗНАК ПІДЗЕМНИХ ОРГАНІВ ЯК ВИДІВ ЛІКАРСЬКОЇ РОСЛИННОЇ СИРОВИНИ.....	91
<i>Т.В. Опрошанська, О.П. Хворост</i>	
НОВОВВЕДЕННЯ У ВИРОБНИЦТВІ ТА ОБІГУ КОСМЕТИЧНИХ ЗАСОБІВ	92
<i>Т. В. Опрошанська, В.О. Лебединець</i>	
БІОЛОГІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ТА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ В РЯДУ СУЛЬФОНІЛПОХІДНИХ 4-(2-МЕТОКСИФЕНІЛ)-5-ФЕНІЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІОЛУ	93
<i>Д. Осінцева, А.С. Гоцуля</i>	
2D КОДУВАННЯ ЯК ІНСТРУМЕНТ ЗАПОБІГАННЯ ФАЛЬСИФІКАЦІЇ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ НА ФАРМАЦЕВТИЧНОМУ РИНКУ УКРАЇНИ.....	94
<i>Панченко А.С., Сахнацька Н.М.</i>	
СТРУКТУРИЗАЦІЯ ЧИННИКІВ ЗОВНІШНЬОГО І ВНУТРІШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА СИСТЕМИ ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ БЕЗПЕКИ УКРАЇНИ.....	95
<i>О.Б. Панькевич</i>	
ДІДЖИТАЛІЗАЦІЙНІ ПІДХОДИ У ПОШУКУ НОВИХ ПРЕПАРАТІВ ДЛЯ ЛІКУВАННЯ РАКУ ПЕРЕДМІХУРОВОЇ ЗАЛОЗИ (повідомлення 2).....	96
<i>Парченко М.В., Бушуєва І.В.</i>	
ВИВЧЕННЯ СТРУКТУРНО-МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СУПОЗИТОРІВ З АМІОДАРОНУ ГІДРОХЛОРИДОМ.....	98
<i>В.О. Перегудов, І.О.Пухальська, Д.М. Сафронова</i>	
ПІДХОДИ ДО МОТИВАЦІЇ ПРАЦІВНИКІВ АПТЕЧНИХ ЗАКЛАДІВ В СУЧАСНИХ УМОВАХ.....	99
<i>І. Попова, К. Савич</i>	
АКТУАЛЬНІ НАПРЯМИ РОЗВИТКУ ІННОВАЦІЙНОЇ КОРПОРАТИВНОЇ КУЛЬТУРИ ФАРМАЦЕВТИЧНИХ КОМПАНІЙ	100
<i>Посилкіна О.В., Лісна А.Г.</i>	
АНАЛІЗ МОЛЕКУЛЯРНИХ ДЕСКРИПТОРІВ 2-(((3-(2-ФТОРФЕНІЛ)-5-МЕРКАПТО-4Н-1,2,4-ТРИАЗОЛ-4-ІЛ)ІМІНО)МЕТИЛ)ФЕНОЛУ	101
<i>Притула Р.Л.</i>	
ДОСЛІДЖЕННЯ ВМІСТУ ФЛАВОНОЇДІВ ЦИНІЇ ПЕРУАНСЬКОЇ	102
<i>О. Т. Прус, Л. В. Слободянюк</i>	
ДОСЛІДЖЕННЯ РОЗЧИННОСТІ ТІЕНОФЛОГІНУ	103
<i>Н.В. Рибак, Л.А. Боднар, Л.І. Вишневська</i>	
ВІРТУАЛЬНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ПОШУКУ АНТИОКСИДАНТІВ: СКОРОЧЕННЯ ЧАСУ І РЕСУРСІВ	104
<i>В.П. Риженко, Д.М. Хорош</i>	
ПРОБЛЕМНІ ПИТАННЯ ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ ДОПОМОГИ ПАЦІЄНТАМ З РОЗСІЯНИМ СКЛЕРОЗОМ В УМОВАХ ВОЄННОГО СТАНУ В УКРАЇНІ	105
<i>С.С. Рижкова, Н.О. Ткаченко</i>	
РЕАЛІЗАЦІЯ ПРИНЦИПІВ КОГНІТИВНОЇ ТЕОРІЇ НАВАНТАЖЕННЯ В СЕРЕДОВИЩІ ПЕРСОНАЛЬНОЇ СИСТЕМИ УПРАВЛІННЯ ЗНАННЯМИ OBSIDIAN В СИСТЕМІ ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ ОСВІТИ.....	106
<i>О.А. Рижов</i>	
ВИКОРИСТАННЯ ТЕХНОЛОГІЙ ГЛИБОКОГО НАВЧАННЯ ДЛЯ СЕГМЕНТАЦІЇ СТРУКТУРНО-ФУНКЦІОНАЛЬНИХ КОМПОНЕНТІВ В ПОВНОСЛАЙДОВИХ ЗОБРАЖЕННЯХ КИШКІВНИКА	107
<i>Д.В. Робота, С.В. Павлов, Б.С. Бурлака</i>	
ПЕРСПЕКТИВИ СТВОРЕННЯ НОВИХ РОСЛИННИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ ДЛЯ СТОМАТОЛОГІЇ	108
<i>А.М. Рудник, Л.М. Сімонян, Д.К. Фокіна</i>	
ДОСВІД ВИКОРИСТАННЯ ТЕХНОЛОГІЙ ДИСТАНЦІЙНИХ ФОРМ НАВЧАННЯ З ЗАСТОСУВАННЯМ СИМУЛЯЦІЙНИХ ПРОГРАМ У ФОРМУВАННІ КЛІНІЧНОГО МИСЛЕННЯ МАГІСТРА ФАРМАЦІЇ	109
<i>О.О. Свинтозельський, О.В. Крайдашенко</i>	
НАПРЯМКИ ОПТИМІЗАЦІЇ ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ ОПІКИ ПРИ АРТЕРІАЛЬНІЙ ГІПЕРТЕНЗІЇ.....	110
<i>О.О. Свинтозельський, О.В. Крайдашенко</i>	
БІОПОЛІМЕРНІ НАНОНОСІЇ ДЛЯ ФАРМАЦІЇ.....	111
<i>О.І. Сидоряк, Н.Л. Зярянюк</i>	