



**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

БІОЛОГІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ТА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ В РЯДУ СУЛЬФОНІЛПОХІДНИХ 4-(2-МЕТОКСИФЕНІЛ)-5-ФЕНІЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТІОЛУ

Д. Осінцева, А.С. Гоцуля

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет (м. Запоріжжя)

andrey.goculya@gmail.com

Сульфонільна група входить до структури відомих лікарських засобів, які проявляють антимікробну, протиракову, гіпоглікемічну, протизапальну та інші види активностей. Зазначеним ефектам сприяє посилена здатність даної групи утворювати міжмолекулярні водневі зв'язки та активно впливати на конформацію молекул. Поєднання даної групи з іншими фармакоформними фрагментами потенційно може призвести до формування біологічної активності певного спрямування або посилення вже існуючої.

Метою роботи була предиктивна оцінка біологічного потенціалу сульфонілпохідних 4-(2-метоксифеніл)-5-феніл-1,2,4-триазол-3-тіолу з наступною оцінкою доцільності створення на їх основі біологічно активної субстанції.

Матеріали та методи. Дизайн бібліотеки досліджуваних сполук був сформований з урахуванням загальних теоретичних засад органічної хімії та, у разі необхідності, синтетичної доступності всіх етапів хімічного перетворення. Теоретичні *in silico* проводились послідовно в три етапи та передбачали визначення токсикологічних властивостей сульфонілпохідних 4-(2-метоксифеніл)-5-феніл-1,2,4-триазол-3-тіолу, їх загальних засад фармакодинаміки та фармакокінетичного профілю. Перший етап передбачав активне залучення он-лайн застосунку TEST (Toxicity Estimation Software Tool), який надав можливість визначити предиктивний рівень гострої токсичності та вірогідність проявлення мутагенних властивостей. Другий етап на основі докінгових досліджень, з використанням моделей пептидної деформілази, ланостерол 14 α -деметилази, циклооксигенази-2 та кінази анапластичної лімфоми, дозволив сформувати попереднє уявлення про можливе виявлення речовин з антимікробною, протигрибковою, протизапальною та протираковою активностями. Даний етап був реалізований за допомогою програм AutoDock 4.2.6, Open Babel 3.1.1, MGL Tools-1.5.6, BIOVIA та AUTOGRIID. Третій етап широко висвітлив відповідність базовим фармакокінетичним критеріям сконструйованих сульфонілпохідних 4-(2-метоксифеніл)-5-феніл-1,2,4-триазол-3-тіолу. Зазначений етап був проведений з залученням багатофункціонального набору інструментів платформи SwissADME. Так, покроково були визначені необхідні фізико-хімічні властивості (пов'язані з будовою, гідрофільно-ліпофільними властивостями, з утворенням міжмолекулярних хімічних зв'язків та інше), можливість подолання бар'єрів (плацентарного, гематоенцефалічного та шкіряного) та впливу на деякі цитохроми (CYP1A2, CYP2C19, CYP2C9, CYP2D6, CYP3A4) і Р-глікопротеїн, вірогідність бути залученим у процеси адсорбції у шлунково-кишковому тракті.

Результати. Сульфонілпохідні 4-(2-метоксифеніл)-5-феніл-1,2,4-триазол-3-тіолу предиктивно демонструють прийнятний рівень нешкідливості на рівні помірно- або малотоксичних сполук. Додатково необхідно зазначити незначну вірогідність формування мутагенності. В подальшому було визначено, що найбільша кількість зв'язків формується з активним сайтом пептидної деформілази та ланостерол 14 α -деметилази, що було додатково підкріплено значеннями мінімальної енергії комплексоутворення. Обнадійливі результати для окремих сполук також були одержані за підсумками комплексної оцінки взаємодії з кіназою анапластичної лімфоми. Натомість, найменші очікування формуються за результатами гнучкого докінгу до активного сайту циклооксигенази-2. Найбільш сприятливий структурний компласнс за результатами докінгу був визначений для сульфонільної групи у разі безпосереднього поєднання з нафтільним, *para*-толуїльним та *para*-нітрофенільним замісниками. Результати *in silico* фармакокінетичних досліджень продемонстрували загальний сприятливий характер.

Висновки. Одержані результати *in silico* досліджень сульфонілпохідних 4-(2-метоксифеніл)-5-феніл-1,2,4-триазол-3-тіолу дозволяють їх обґрунтовано рекомендувати для подальших *in vitro* та *in vivo* досліджень для створення біологічно активної субстанції.

2D КОДУВАННЯ ЯК ІНСТРУМЕНТ ЗАПОБІГАННЯ ФАЛЬСИФІКАЦІЇ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ НА ФАРМАЦЕВТИЧНОМУ РИНКУ УКРАЇНИ

Панченко А.С., Сахнацька Н.М.

Кафедра організації та економіки фармації

Національний медичний університет імені О.О. Богомольця (м.Київ)

lina.panchenko00@gmail.com

sakhnatskaya@ukr.net

Вступ. За офіційними даними ВООЗ, близько 10 % світового ринку лікарських засобів (ЛЗ) є фальсифікованими. У 2023 році Державною службою України з лікарських засобів та контролю за наркотиками було надано 24 розпорядження про заборону обігу 26 серій 25 найменувань фальсифікованих ЛЗ (згідно офіційної звітності). Головною причиною можна вважати високу вартість оригінальних препаратів та бажання споживачів зекономити, купуючи ліки в Інтернеті за значно нижчою ціною на сумнівних веб-ресурсах. Крім того, гостро постає питання забезпечення населення якісними та безпечними лікарських засобів у період воєнного стану. **Метою роботи** є дослідження аспектів впровадження 2D кодування як інструмента запобігання поширенню фальсифікованих та контрафактних ЛЗ.

Матеріали та методи дослідження. Використано контент-аналіз наукових джерел, електронних ресурсів і нормативно-правової бази, а також логічний та метод узагальнення.

Результати і обговорення. 2D кодування - розміщення двовимірного штрих-коду (QR коду), який зчитується цифровими пристроями. Порівняно із звичайним штрих-кодом, двовимірний код можна зчитувати у двох напрямках, що дозволяє розмістити набагато більше даних про лікарський засіб, зокрема номер серії, дату виробництва та термін придатності.

Упровадження 2D кодування є сталою практикою за кордоном. Ще у 2011 році ЄС прийняв Директиву 2011/62/EU, основними положеннями якої є розміщення 2D-кодування на усіх рецептурних препаратах, контроль першого відкриття упаковки та наявність унікального ідентифікатора на пакуванні ЛЗ. До 2019 року усі країни-члени ЄС, крім Греції та Італії (для них - з лютого 2025 року) повинні були гармонізувати законодавство відповідно до положень Директиви. Україна поступово переходить на стандарти та вимоги Європейського Союзу (ЄС) щодо протидії фальсифікованим ЛЗ, зокрема Постановою КМУ № 653 від 24.07.2019 було запроваджено пілотний проєкт щодо маркування контрольними (ідентифікаційними) знаками ЛЗ, який тривав до 30 грудня 2020 року. У 2022 році Парламент ухвалив нову редакцію Закону України «Про лікарські засоби», який, зокрема, орієнтований на запобігання обігу фальсифікованих ліків, а саме – впровадження в Україні системи верифікації ліків із двовимірним кодуванням. З 1 січня 2026 року процес впровадження 2D-кодування є добровільним, а з 1 січня 2028 року - носитиме обов'язковий характер.

На сьогодні в Україні вже є позитивний досвід впровадження системи нанесення 2D коду на кожну упаковку лікарського засобу. Фармацевтична компанія «Інтерхім» поки є єдиним в Україні підприємством, де впроваджено такі інновації. Впровадження такої технології спрощує процеси логістики та обліку лікарських засобів, дозволяє швидко відстежувати переміщення ліків на усіх етапах ланцюга постачання від виробника до кінцевого споживача.

Висновки. Фальсифікація лікарських засобів залишається актуальною проблемою, яка потребує комплексного вирішення. Впровадження системи 2D-кодування в Україні є дієвим інструментом для підвищення прозорості обігу лікарських засобів, запобігання їх фальсифікації. Досвід міжнародної практики та перші кроки українських фармацевтичних компаній демонструють потенціал цієї технології для гармонізації вітчизняного фармацевтичного ринку із європейськими стандартами.

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 ТІЄНОФЛОГІНУ	103
<i>Н.В. Рибак, Л.А. Боднар, Л.І. Вишневецька</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.Є. 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>	