

**SCI-CONF.COM.UA**

**SCIENCE AND TECHNOLOGY:  
PROBLEMS, PROSPECTS  
AND INNOVATIONS**



**PROCEEDINGS OF VII INTERNATIONAL  
SCIENTIFIC AND PRACTICAL CONFERENCE  
APRIL 13-15, 2023**

**OSAKA  
2023**

# **SCIENCE AND TECHNOLOGY: PROBLEMS, PROSPECTS AND INNOVATIONS**

Proceedings of VII International Scientific and Practical Conference

Osaka, Japan

13-15 April 2023

**Osaka, Japan**

**2023**

## UDC 001.1

The 7<sup>th</sup> International scientific and practical conference “Science and technology: problems, prospects and innovations” (April 13-15, 2023) CPN Publishing Group, Osaka, Japan. 2023. 498 p.

## ISBN 978-4-9783419-1-4

The recommended citation for this publication is:

*Ivanov I. Analysis of the phaunistic composition of Ukraine // Science and technology: problems, prospects and innovations. Proceedings of the 7th International scientific and practical conference. CPN Publishing Group. Osaka, Japan. 2023. Pp. 21-27. URL: <https://sci-conf.com.ua/vii-mizhnarodna-naukovo-praktichna-konferentsiya-science-and-technology-problems-prospects-and-innovations-13-15-04-2023-osaka-yaponiya-arhiv/>.*

### Editor

**Komarytskyy M.L.**

*Ph.D. in Economics, Associate Professor*

Collection of scientific articles published is the scientific and practical publication, which contains scientific articles of students, graduate students, Candidates and Doctors of Sciences, research workers and practitioners from Europe, Ukraine and from neighbouring countries and beyond. The articles contain the study, reflecting the processes and changes in the structure of modern science. The collection of scientific articles is for students, postgraduate students, doctoral candidates, teachers, researchers, practitioners and people interested in the trends of modern science development.

**e-mail:** [osaka@sci-conf.com.ua](mailto:osaka@sci-conf.com.ua)

**homepage:** <https://sci-conf.com.ua>

©2023 Scientific Publishing Center “Sci-conf.com.ua” ®

©2023 CPN Publishing Group ®

©2023 Authors of the articles

15. *Скляр Д. І., Фомін В. С., Дарина В. П., Стельмах А. В., Сухоносів Р. О.* 82  
 ПАСИВНЕ ЛІМФАТИЧНЕ СЕРЦЕ
16. *Тіщенко О. М., Зубрій О. В.* 86  
 ГЕРПЕТИЧНІ НАСЛІДКИ ПРИ ВАГІТНОСТІ
17. *Чорна Т. С., Музичук О. М., Сутиська К. Ю., Ксинін М. І., Лучків Я. В.* 88  
 РОЛЬ ГЕНА DISC1 ТА ЙОГО ПОЛІМОРФІЗМІВ У СПРИЙНЯТЛИВОСТІ ДО ШИЗОФРЕНІЇ

#### PHARMACEUTICAL SCIENCES

18. *Ikrame El Bergui, Oliinyk S., Yarnykh T., Buryak M.* 96  
 MODERN ASPECTS OF STANDARDIZATION OF HOMEOPATHIC MEDICINAL PREPARATIONS
19. *Котенко О. М., Пуль-Лузан В. В., Гончар А. П.* 102  
 ОБГРУНТУВАННЯ СКЛАДУ ЗАСОБУ ДЛЯ ОЧИЩЕННЯ ШКІРИ ГОЛОВИ
20. *Яременко В. Д., Страшненко Ю. В.* 110  
 ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДІВ IN SILICO ПРИ РОЗРОБЦІ ПОТЕНЦІЙНИХ АФІ НА ОСНОВІ МАГНІЮ ГАЛОГЕНАНТРАНІЛАТІВ

#### CHEMICAL SCIENCES

21. *Mukhina K. E.* 115  
 THE ISSUE OF ENSURING FOOD SAFETY OF THE STATE

#### TECHNICAL SCIENCES

22. *Dakhno O., Spilnyk M., Uzhelovskyi A., Uzhelovskyi V.* 124  
 DISCRETE OPTIMIZATION AS A METHOD FOR CREATING TELESCOPIC WORKING EQUIPMENT FOR EXCAVATORS
23. *Fialko N. M., Presich G. O., Gnedash G. O., Novakivskii M. O.* 131  
 PROGRESSIVE HEAT-RECOVERY TECHNOLOGY FOR THE PERFECTION OF GAS-FIRED STEAM BOILER PLANTS
24. *Sanin A., Polishko S., Nosova T., Mamchur S.* 138  
 THE USE OF CARBON FIBER IN AVIATION AND ROCKET AND SPACE TECHNOLOGY
25. *Tron Yu., Vasko K.* 142  
 THE IMPORTANCE OF COLOUR IN WEB-DESIGN. EFFECTIVE METHODS OF BUILDING USER-FRIENDLY WEBSITES
26. *Zamorska I., Smelyanets O.* 148  
 FACTORS INFLUENCING THE POST-HARVEST QUALITY OF GARDEN STRAWBERRIES (REVIEW)

**ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДІВ IN SILICO ПРИ РОЗРОБЦІ  
ПОТЕНЦІЙНИХ АФІ НА ОСНОВІ МАГНІЮ ГАЛОГЕНАНТРАНІЛАТІВ**

**Яременко Віталій Дмитрович**

к.фарм.н., доцент

**Страшненко Юлія Василівна**

Студент

Національний фармацевтичний університет

м. Харків, Україна

**Анотація:** експериментально в лабораторних умовах здійснено синтез потенційних активних фармацевтичних інгредієнтів (АФІ), де в якості активного фармакофору були обрані магнію галогенантранілати з метою подальшого їх визначення видів біологічної активності з використанням *in silico* методів комп'ютерно-математичного моделювання.

**Ключові слова:** активний фармацевтичний інгредієнт, *in silico* дослідження, магнію галогенантранілати, комп'ютерно-математичне моделювання.

Сучасна фармацевтична наука при розробці нових потенційних АФІ перш ніж починати проводити фармакологічний скринінг, проводить різноманітні теоретичні *in silico* дослідження по відношенню до експериментально одержаних або перспективних, але ще не синтезованих, сполук.

Концепція кількісного взаємозв'язку структура-активність (QSAR), розроблена на початку 1960-х років Hansch / Fujita [1, с. 1616-1626] та Free / Wilson [2, с. 395-399] і широко використовується при створенні лікарських засобів, передбачає, що молекули зі схожою структурою потенційно проявляють подібну хімічну та біологічну активність [3, с. 4289–4297].

Початкова концепція взаємозв'язку структура-активність бере свій початок у 1868 році, коли Крам-Браун і Фрейзер представили ідею кореляції

хімічного складу певної сполуки з її фізіологічними властивостями в біологічних системах [4, с. 224–242].

Впровадження комп'ютерно-математичного моделювання дозволяє на первинному етапі до біологічних досліджень виявити сполуку лідера або виявити фармакофор, за сприянням якого і формується спектр біологічної дії експериментальної молекули. Це дозволяє активізувати та оптимізувати наукові дослідження, підвищити економічність процесів, зекономити час, зберегти життя тварин.

В сучасній експериментальній науці існує багато різноманітних методів обчислення шляхом генерації та порівняння вже існуючих з ще невідомими дескрипторами.

В якості прикладу можливо навести наступні програми: CASE Ultra (<http://www.multicase.com/case-ultra>) та Leadscope (<http://www.leadscope.com/>).

В якості прикладу наведено сайти основних онлайн-систем для розрахунків молекулярних дескрипторів:

- <http://research.chem.psu.edu/pcjgroup/adapt.html>;
- <http://www.simulations-plus.com/software/admet-property-prediction-qsar>;
- <https://www.chemaxon.com/products>;
- <http://www.codessa-pro.com>;
- <https://www.mn-am.com/products/corinasymphony>;
- [https://chm.kode-solutions.net/products\\_dragon.php](https://chm.kode-solutions.net/products_dragon.php);
- <http://www.vcclab.org/lab/edragon>;
- [http://www.chemcomp.com/MOE-Cheminformatics\\_and\\_QSAR.htm](http://www.chemcomp.com/MOE-Cheminformatics_and_QSAR.htm);
- <http://www.edusoft-lc.com/molconn>;
- <http://molgen.de/download.html>;
- <http://www.yapcsoft.com/dd/padeldescriptor>;
- <https://www.niss.org/research/software/powermv>;
- <https://preadmet.bmdrc.kr/> о <http://openbabel.org>;
- <https://www.schrodinger.com/qikprop>;

- <https://www.acdlabs.com/products/percepta>;
- <http://openmopac.net/> s <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/download-epi-suitetm-estimation-program-interface-v411>;

Також в теперішній час багато розроблено онлайн-систем для прогнозування метаболізму ліків:

- <http://www.fqs.pl/en/chemistry/products/admeworks-predictor>;
- <http://www.simulations-plus.com/software/admet-property-prediction-qsar/metabolism>;
- <http://lmmd.ecust.edu.cn:8000>;
- <https://preadmet.bmdrc.kr>;
- <https://smartcyp.sund.ku.dk>;
- <http://www.way2drug.com>.

Але у багатьох програм є один загальний недолік, базова кількість дескрипторів як правило не перевищує 1500-2000 базових структур.

Програма PASS заснована на аналізі залежностей "структура-активність" для речовин із навчальної вибірки, що містить понад 45000 різноманітних біологічно активних речовин (субстанції відомих лікарських препаратів та фармакологічно активні сполуки). Навчальна вибірка постійно поповнюється новою інформацією про біологічно активні речовини, що відбирається як із публікацій у науково-технічній літературі, так і з численних баз даних.

Хімічна структура представлена у PASS у вигляді оригінальних MNA дескрипторів (Multilevel Neighbourhoods of Atoms). MNA дескриптори мають універсальний характер і з досить гарною точністю описують різноманітні залежності "структура-властивість". Використовуваний у PASS математичний алгоритм був відібраний шляхом цілеспрямованого аналізу та порівняння ефективності для вирішення подібних завдань великої кількості різних методів. Показано, що цей алгоритм забезпечує отримання стійких у статистичному сенсі залежностей "структура-активність" і, відповідно, результатів прогнозу. Це дуже важливо, оскільки включені в навчальну вибірку дані завжди мають певну неповноту як щодо охоплення всіх хімічних класів речовин, що мають

конкретний вид активності, так і щодо вивченості кожної окремої речовини на всі можливі види активності.

Метою роботи було синтетичне одержання потенційних АФІ з використанням відомих фармакофорів (магнію галогенантранілатів), проведення дослідження потенційної їх фармакологічної активності з використанням спеціалізованого комп'ютерно-математичного моделювання за допомогою методу PASS.

Для цього було проведено аналіз та систематизація існуючої та сучасної наукової та патентної літератури з приводу *in silico* прогнозування методів комп'ютерного молекулярного моделювання та практичного їх використання з метою оптимізації експериментального пошуку нових потенційних біологічно активних речовин, потенційних АФІ, з прогнозованими видами біологічної дії на основі магнію галогенантранілатів, також здійснено методи екстраполяції та візуалізації результатів прогнозування можливих видів біологічної активності вищезазначених сполук.

Основними критеріями оцінки фармакологічної активності досліджених сполук є показники  $P_a$  (коефіцієнт вірогідності знаходження у сполуки вказаної активності) і  $P_i$  (коефіцієнт вірогідності того, що дана активність, у сполуки проявлена не буде). Вважається, що чим більше інтервал між  $P_a$  і  $P_i$  ( $P_a \gg P_i$ ), тим вище вірогідність прояву вказаної фармакологічної активності у тестованій сполуки.

У разі, коли  $P_a = P_i$ , вірогідність появи вказаної фармакологічної активності мінімальна (прагне до нуля).

За наслідками тестування встановлено: найбільш вірогідні види фармакологічної активності, характерні похідним магнію галогенантранілатам – нейропротекторна, ноотропна, психостимулююча, кардіопротекторна; зустрічаються також достатньо часто протизапальна, протисудомна, імуномодулююча активності.

За наслідками тестування можливо зробити узагальнення про перспективність подальшого фармакологічного вивчення магнію



галогенантранілатів. Причому, фармакологічні дослідження бажано проводити у напрямі вивчення нейропротекторної та ноотропної активностей.

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Hansch C., Fujita T.  $\rho$ - $\sigma$ - $\pi$  analysis. A method for the correlation of biological activity and chemical structure. *J. Am. Chem. Soc.* 1964. Vol. 86. P. 1616-1626.

2. Free S. M. Jr, Wilson J. W. A mathematical contribution to structure-activity studies. *J. Med. Chem.* 1964. Vol. 7. P. 395–399.

3. Gertrudes J C., Maltarollo V. G., Silva R. A., Oliveira P. R., Honório K. M., da Silva A. B. Machine learning techniques and drug design. *Curr Med Chem.* 2012. Vol. 19, № 25. P. 4289–4297. doi: 10.2174/092986712802884259

4. Brown A. C., Fraser T. R. On the connection between chemical constitution and physiological action; with special reference to the physiological action of the salts of the ammonium bases derived from strychnia, brucia, thebaia, codeia, morphia, and nicotia. *J. Anat. Physiol.* 1868. Vol. 2. P. 224–242.