



Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра загальної хімії
Українське товариство з медичної хімії

Міжнародна internet-конференція

Modern chemistry of medicines

7 листопада 2025 р.
м. Харків, Україна

Посвідчення Державної наукової
установи «Український інститут
науково-технічної експертизи та
інформації» № 850 від 26.12.2024 р.

Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра загальної хімії
Українське товариство медичної хімії

Ministry of health of Ukraine
Ministry of education and science of Ukraine
National university of pharmacy
Pharmaceutical chemistry department
General chemistry department
Ukrainian Society of Medicinal Chemistry

MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES

Матеріали
Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,
7 листопада 2025 року

Materials
of the International Internet Conference ‘Modern chemistry of medicines’,
November 7, 2025

ХАРКІВ
KHARKIV
2025



УДК 615.3(06)
М 78

Електронне видання мережне

Редакційна колегія: проф. Кухтенко О.С., проф. Георгіянець В.А., проф. Колісник С.В., проф. Северіна Г.І., проф. Перехода Л.О., доц. Михайленко О.О., доц. Криськів О.С., доц. Кобзар Н.П., доц. Смілова Н.М., ас. Маслов О.Ю., Сайфудінова Р.П.

Конференція зареєстрована в УкрІНТЕІ (посвідчення №850 від 26.12.2024)

Modern chemistry of medicines: матеріали Міжнародної Internet-конференції (7 листопада 2025 р., м. Харків) – Електрон. дані. – Х. : НФаУ, 2025. – 193 с. – Назва з тит. екрана.

Збірник містить матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (7 листопада 2025 р., м. Харків) присвячені висвітленню сучасних тенденцій створення оригінальних АФІ синтетичного та рослинного походження, фармацевтичної розробки, забезпечення якості лікарських засобів.

Для широкого кола наукових та практичних фахівців у галузі фармації та медицини, магістрантів, аспірантів, докторантів, співробітників фармацевтичних підприємств, викладачів закладів вищої освіти.

*Редколегія не завжди поділяє погляди авторів.
Автори опублікованих матеріалів несуть повну відповідальність за підбір,
точність наведених фактів, цитат, економіко-статистичних даних,
власних імен та інших відомостей.
Матеріали подаються мовою оригіналу.*

УДК 615.3(06)

© НФаУ, 2025



Computational and Structural Insights into *Epilobium* Polyphenols Targeting SARS-CoV-2

Dave Senea Ngantung¹, Sedin Renadi¹, Monu Kumar Shukla¹, Olha Mykhailenko^{2,3,4}, Mohamed El-Shazly⁷, Victoriya Georgiyants², Kateryna Uminska⁵, Yu-Li Chen⁶, Tsong-Long Hwang⁶, Michal Korinek^{1*}

¹Graduate Institute of Natural Products, College of Pharmacy, Kaohsiung Medical University, Kaohsiung 80708, Taiwan;

²Department of Pharmaceutical Chemistry, National University of Pharmacy, Kharkiv, Ukraine;

³Pharmacognosy and Phytotherapy Group, UCL School of Pharmacy, London, UK;

⁴Department of Pharmaceutical Biology, Kiel University, Kiel, Germany;

⁵Zhytomyr Basic Pharmaceutical Professional College, Zhytomyr, Ukraine;

⁶Graduate Institute of Health Industry Technology and Research Center for Chinese Herbal Medicine, College of Human Ecology, Chang Gung University of Science and Technology, Taoyuan 33302, Taiwan;

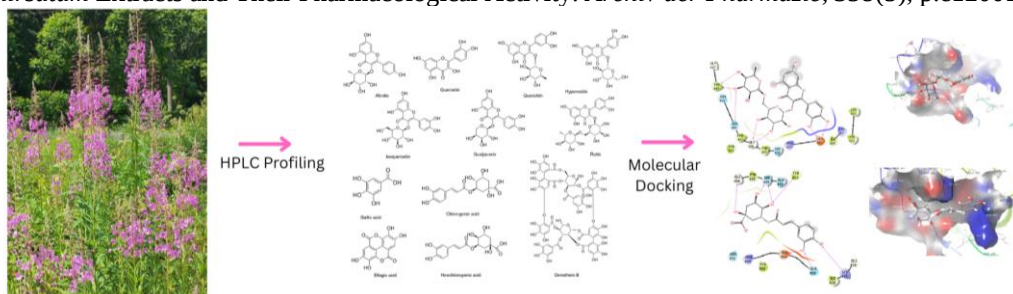
⁷Department of Pharmacognosy, Faculty of Pharmacy, Ain Shams University, Cairo, Egypt

*Corresponding author e-mail: michalk@kmu.edu.tw

Epilobium species (Onagraceae) are used in European traditional medicine, including hairy willowherb (*Epilobium hirsutum*), fireweed (*E. angustifolium*), and small-flowered willowherb (*E. parviflorum*) with anti-inflammatory, anti-infective and urological- and prostate- and urinary tract protective properties. The *E. hirsutum* (also known as “hairy willowherb”) has not been sufficiently tested as an antiviral agent. The inhibition of the SARS-CoV-2 spike (S) glycoprotein-ACE2 receptor interaction represents a key antiviral target at the viral entry stage. In this study, water extracts from *E. hirsutum* demonstrated significant suppression of SARS-CoV-2 Omicron pseudovirus infection (up to 50% inhibition at 10 µg/mL) without cytotoxicity to hACE2-overexpressing HEK293T cells. HPLC profiling identified oenotherin B as the predominant constituent (141.4 mg/g), accompanied by phenolic compounds, such as rutin, quercitrin, and chlorogenic acid. Molecular docking and simulation studies revealed distinct structure-activity features among these polyphenols. Rutin and chlorogenic acid, both bearing a 3',4'-dihydroxylated B-ring, showed high binding affinities toward the spike protein (docking energies of -8.4 to -12.6 kcal/mol), forming stable hydrogen bonds with spike protein residues (His34, Lys353, Arg403, Tyr495) that are known to interact with ACE2. Interestingly, oenotherin B was biologically active against Omicron pseudovirus infection assay in hACE2-overexpressing HEK293T cells with IC₅₀ = 6.08 µM. These findings highlight the relevance of *Epilobium* phenolics as structurally diverse scaffolds for SARS-CoV-2 inhibition, with rutin and oenotherin B serving as representative models for exploring synergistic antiviral mechanisms. These results show antiviral properties of phenolic compounds and extracts from *Epilobium* tea herbal medicines.

Reference

Uminska, K., Korinek, M., Ivanauskas, L., El-Shazly, M., Georgiyants, V., Chen, Y.L., Shukla, M.K., Renadi, S., Hwang, T.L., Chang, F.R. and Mykhailenko, O., 2025. Assessment of the Phenolics Content in *Epilobium angustifolium* and *Epilobium hirsutum* Extracts and Their Pharmacological Activity. *Archiv der Pharmazie*, 358(5), p.e12001.





Computational and Structural Insights into Epilobium Polyphenols Targeting SARS-CoV-2	32
Dave Seneca Ngantung, Sedin Renadi, Monu Kumar Shukla, Olha Mykhailenko, Mohamed El-Shazly, Victoriya Georgiyants, Kateryna Uminska, Yu-Li Chen, Tsong-Long Hwang, Michal Korinek	
Formulation and evaluation of extrusion-based 3D printed dosage forms of flavonoids	33
Oleh Koshovyi, Kristiine Roostar, Jyrki Heinämäki, Ain Raal	
Molecular modeling of potential inhibitors of inflammatory cascade enzymes from bioactive components of <i>Matricaria suaveolens</i>	34
Maryna Kovtun, Nataliia Kobzar, Hanna Severina	
N-Alkoxyhydantoins. 1-Alkoxy-5-phenylimidazolidine-2,4-diones synthesis by phenylglyoxal interaction with N-alkoxy-N-(triphenylphosphonium)urea chlorides	35
Vasyl Shtamburg, Svitlana Kravchenko, Evgen Klots, Victor Shtamburg, Andrey Anishchenko	
Formulation and manufacturing technology development of a topical antifungal drug	36
Oksana Kryshchyk, Anastasia Kulyk	
Quantitative determination of <i>trans</i>-Anethole in Italian aniseed drink «Sambuca» by chemiluminescence method	37
Oleg Kryskiv, Mykola Blazheyevskiy, Valeriy Moroz, Oleg Shpychak	
Validation of the method of quantitative determination of the active substance (S)-2,6-diaminohexanoic acid 3-methyl-1,2,4-triazolyl-5-thioacetate in eye drops.....	38
Luidmyla Kucherenko, Olga Khromylova, Ganna Nimenko	
Comparative Study of Hydrophilic and Lipophilic Natural Deep Eutectic Solvents for Extraction of Bioactive Compounds from <i>Symphytum officinale</i> and <i>Echium vulgare</i>.....	39
Magdalena Kulinowska, Sławomir Dresler, Agnieszka Skalska-Kamińska, Łukasz Kulinowski, Maciej Strzemski	
Age-dependent efficacy of L-arginine and nitrate supplementation in modulating nitric oxide bioavailability	40
Natalia Kurhaluk, Halina Tkaczenko	
Comparative analysis of flavonoid content in fruits of Ukrainian and Armenian origin	41
Andranik Kutsanyan, Liudas Ivanauskas, Mindaugas Marksa, Olha Mykhailenko, Victoriya Georgiyants	
Structural optimization of losartan as an approach to the design of new angiotensin II receptor antagonists	42
Tetiana Maltseva, Olga Golovchenko, Hanna Severina	
The investigation total content of phenolic compounds in the blackberry fresh fruit	43
Artem Marchenko, Mykola Komisarenko, Oleksandr Maslov	
The investigation total content of free organic acids in the blackberry fresh fruit	44
Artem Marchenko, Mykola Komisarenko, Oleksandr Maslov	
The investigation total content of phenolic compounds in the blackberry (<i>Rubus plicatus</i>) leaves.....	45
Artem Marchenko, Mykola Komisarenko, Oleksandr Maslov	
The investigation total content of flavonoids in the blackberry (<i>Rubus plicatus</i>) leaves.....	46
Artem Marchenko, Mykola Komisarenko, Oleksandr Maslov	



Наукове електронне видання мережне

«MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES»

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

За матеріалами
Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,
7 листопада 2025 року, м. Харків

Відповідальна особа за випуск
Георгіянц В. А.

Комп'ютерна верстка
Криськів О. С.

Оформлення обкладинки
Смєлова Н. М.

Національний фармацевтичний університет
вул. Григорія Сковороди, 53, м. Харків, 61002