



03126, м. Київ, бульвар Вацлава Гавела, 34-б, офіс 65;
Тел.: (050) 644-38-30;
e-mail: maon@ukr.net

Ідентифікаційний код юридичної особи: 40486274

Вих. № 50 від 14.04.2025 р.

ІНФОРМАЦІЙНЕ ПОВІДОМЛЕННЯ

Вельмишановні колеги !

Запрошуємо Вас взяти участь у майстер-класі **«Комп'ютерне прогнозування у дослідженні властивостей біологічно активних речовин та лікарських засобів»**, який відбудеться **15 травня 2025 року** на платформі ZOOM, початок о 10:00, закінчення – 13:00.

Метою проведення майстер-класу є засвоєння сучасних AI Tools технологій комп'ютерного прогнозування фізико-хімічних параметрів, фармакологічних властивостей, токсичності та визначення біомішеней біологічно активних речовин та лікарських засобів з метою впровадження отриманих результатів у медичну та фармацевтичну практики.

Анотація заходу. Пошук нових перспективних біологічно активних речовин (БАР) як потенційних лікарських засобів (ЛЗ) базується не тільки на їх специфічній фармакологічній активності, але й на мінімумі токсичних ефектів, задовільних фармакокінетичних і біофармацевтичних характеристиках. Раціональний дизайн ліків (*drug design*) є однією із сучасних концепцій створення ЛЗ, в основі якого лежить цілеспрямований пошук БАР з їх подальшим дослідженням в умовах *in silico*: молекулярне моделювання, віртуальний скринінг, модифікація фармакофорних угруповань тощо. Дослідження *in silico* має переваги: скорочення часу дослідження, піддослідних тварин та коштів на лабораторне устаткування. Програми комп'ютерного прогнозування SwissTargetPredictio (SIB Swiss Institute of Bioinformatics), Protox мають можливості поєднання 2D і 3D форматів досліджуваної молекули з аналізом їх подібності із речовинами порівняння. Це дозволяє прогнозувати біологічні мішені, на які будуть впливати малі молекули (ЛЗ) та потенційно біологічно активні молекули. Прогнозування на основі лігандів є, також, високопродуктивним і швидким в контексті відкриття ліків.

QSPR (Quantitative Structure–Property Relationship) та QSAR (Quantitative Structure–Activity Relationship) моделі є провідними інструментами комп'ютерної хімії, що дозволяють математично описати зв'язки між молекулярною структурою сполук та їхніми фізико-хімічними,

біологічними чи фармакокінетичними властивостями. У центрі уваги майстер-класу – практичні приклади побудови моделей, вибір релевантних дескрипторів, опрацювання даних та оцінка надійності прогнозів. Для практичної фармації це можливість суттєво прискорити розробку ЛЗ, знизити витрати на експерименти, а також зменшити ризики на ранніх етапах створення нових препаратів шляхом обґрунтованого *in silico* аналізу.

Використання програм комп'ютерного прогнозування у експериментальних наукових роботах під час створення нових біологічно активних молекул допомагає досліднику отримати дані щодо їх фізико-хімічних параметрів, фармакологічної активності, токсичності, біологічних структур впливу. Це дозволяє планування подальшого дослідження сполук-лідерів як потенційних лікарських засобів. За допомогою програм комп'ютерного прогнозування стає доступним отримання додаткової інформації щодо фармакологічної активності та токсичності відомих активних фармацевтичних інгредієнтів (АФІ). Це відкриває нові напрямки їх вивчення та використання в медичній та фармацевтичній практиках. Актуальна інформація майстер-класу викладена в доступній формі, містить достатню кількість ілюстративного матеріалу і може бути корисною для широкої аудиторії фармацевтичних фахівців.

Захід розраховано на освітян, науковців із числа докторів і кандидатів наук, докторів філософії, докторантів, аспірантів, магістрантів, фармацевтів та фармацевтів-інтернів, лікарів, викладачів закладів вищої освіти та фахівців медичних, фармацевтичних і педагогічних профілів.

Для підтвердження участі у майстер-класі просимо зареєструватися, надіславши заявку на електронну адресу: **maon@ukr.net** (додаток І).

Майстер-клас проводить докторка фармацевтичних наук, професорка, професорка кафедри хімії ліків та лікарської токсикології Національного медичного університету імені О.О. Богомольця, академік ГО «НАН ВО України» та ГО «МАОН» **Вельчинська Олена Василівна**.

Участь у майстер-класі – 500 грн з особи, які слід сплатити на розрахунковий рахунок: UA243052990000026004046707076 в АТ КБ «ПРИВАТБАНК» у м. Києві, ЄДРПОУ 40486274. Призначення платежу: «Оргвнесок за участь у майстер-класі від ППБ».

Реєстрацію на захід відкрито до **14.05.2025 року (не пізніше 12:00)**.

Зареєстровані учасники майстер-класу, які сплатили за його участь, отримають онлайн-посилання 14.05.2025 р., і при успішному проходженні тестування відповідний сертифікат із зазначенням 10 балів БПР (провайдер № 2103).

Координатор: *Тетяна Товалович*; e-mail: *maon@ukr.net*,
тел.: +380977084368.