

over time, and energy requirements are being addressed through innovative material design. Commercialization of CHs involves scalability, development of degradation criteria, and clinical testing. Continued research will pave the way for widespread adoption of CHs as the material of choice for novel diagnostic, treatment, and prosthetic devices [1–3].

### References

1. Dutta T., Chaturvedi P., Llamas Garro I., Velazquez Gonzalez J.S., Dubey, R., Mishra S.K. Smart materials for flexible electronics and devices: hydrogel. *RSC Adv.* 2024. 14. P.12984–13004.
2. Shen, C.; Wang, Y.; Yuan, P.; Wei, J.; Bao, J.; Li, Z. Conductive Hydrogels in Biomedical Engineering: Recent Advances and a Comprehensive Review. *Gels.* 2026. 12(1). 69.
3. Yuk, H.; Lu, B.; Zhao, X. Hydrogel bioelectronics. *Chem. Soc. Rev.* 2019, \*48\*, 1642–1667. DOI: 10.1039/C8CS00595H

**Новікова Є.О. Вороніна-Тузівських Ю.В., Бондар О.С., Янченко В.О.**

*Кафедра хімії, технологій та фармації Національного університету  
„Чернігівський колегіум” імені Т.Г. Шевченка, Чернігів, Україна*

### **СУЧАСНІ МЕТОДИ ОЦІНКИ БЕЗПЕКИ ТА ТОКСИЧНОСТІ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ**

Узагальнено сучасні підходи до оцінки безпеки та токсичності лікарських засобів на доклінічному та клінічному етапах. Проаналізовано традиційні *in vivo* та *in vitro* методи, а також інноваційні підходи, зокрема *in silico* моделювання, токсикогеноміку, використання штучного інтелекту та даних реальної клінічної практики (Real-World Evidence). Показано тенденцію до переходу від експериментів на тваринах до альтернативних методів оцінки токсичності, що підвищує етичність, швидкість і точність досліджень. Обґрунтовано значення інтегрованих стратегій оцінки безпеки лікарських засобів у контексті сучасних регуляторних вимог ЄС та України.

**Ключові слова:** токсикологія лікарських засобів, безпека, доклінічні дослідження, *in vitro*, *in silico*, фармаконагляд, QIVIVE, токсикогеноміка, штучний інтелект, RWE.

Contemporary approaches to the assessment of the safety and toxicity of medicinal products at both preclinical and clinical stages are summarized. Traditional *in vivo* and *in vitro* methods are analyzed alongside innovative approaches, including *in silico* modeling, toxicogenomics, the application of artificial intelligence, and the use of real-world clinical data (Real-World Evidence). A clear trend toward the transition from animal experimentation to alternative toxicity assessment methods is demonstrated, contributing to improved ethical standards, increased efficiency, and enhanced accuracy of research. The significance of integrated strategies for the safety

evaluation of medicinal products is substantiated within the framework of current regulatory requirements of the European Union and Ukraine.

**Keywords:** drug toxicology, safety, preclinical studies, *in vitro*, *in silico*, pharmacovigilance, QIVIVE, toxicogenomics, artificial intelligence, RWE.

Оцінка безпеки та токсичності лікарських засобів є ключовим етапом фармацевтичної розробки, що визначає можливість їх подальшого клінічного застосування. Традиційно цей процес базується на доклінічних дослідженнях, які включають визначення гострої, субхронічної та хронічної токсичності, а також дослідження токсикокінетики і токсикодинаміки [1].

Класичні підходи передбачають використання експериментальних моделей *in vivo*, що дозволяють оцінити системну дію лікарських засобів. Однак ці методи є тривалими, дорогавартісними та етично дискусійними, що стимулює розвиток альтернативних стратегій оцінки токсичності [6]. У сучасній токсикології значного поширення набули методи *in vitro*, які базуються на використанні клітинних культур та тканинних моделей, що дозволяють досліджувати механізми токсичної дії на молекулярному рівні.

Особливе значення мають *in silico* методи, зокрема QSAR-моделювання та підходи read-across, які дозволяють прогнозувати токсичність на основі хімічної структури речовин без проведення експериментальних досліджень [5]. Використання комп'ютерного моделювання значно скорочує час і витрати на розробку лікарських засобів, а також сприяє зменшенню використання лабораторних тварин.

Сучасні тенденції розвитку токсикології включають застосування методів токсикогеноміки, високопродуктивного скринінгу та штучного інтелекту. Зокрема, алгоритми інтелектуального аналізу даних дозволяють інтегрувати дані *in vitro*, *in vivo* та клінічних досліджень для більш точного прогнозування токсичних ефектів [4]. Це сприяє формуванню концепції Next Generation Risk Assessment (NGRA), що базується на комплексному аналізі даних різного походження.

Важливим напрямом є також екстраполяція результатів з рівня клітин на рівень організму (QIVIVE), яка дозволяє прогнозувати клінічні наслідки токсичності на основі лабораторних досліджень [6]. Цей підхід забезпечує більш точне відображення реальних умов застосування лікарських засобів.

На клінічному етапі оцінка безпеки доповнюється фармаконаглядом і аналізом даних реальної медичної практики (Real-World Evidence), що включають електронні медичні записи, страхові бази даних і повідомлення про побічні реакції [3]. Використання таких даних дозволяє оцінити співвідношення «користь/ризик» лікарських засобів у реальних умовах застосування [2].

Отже, сучасна система оцінки токсичності лікарських засобів характеризується переходом до інтегрованих підходів, які поєднують експериментальні, обчислювальні та клінічні методи. Це забезпечує підвищення точності прогнозування

токсичних ефектів, оптимізацію процесу розробки препаратів і відповідність міжнародним стандартам безпеки.

### Перелік інформаційних джерел

1. Лікарська токсикологія. Доклінічні дослідження / за ред. І. М. Трахтенберга. Київ: Авіцена, 2020. 539 с.
2. Оцінка співвідношення користь/ризик лікарських засобів: сучасні підходи [Електронний ресурс]. ДЕЦ МОЗ України. 2025. Режим доступу: <https://www.dec.gov.ua>
3. Сучасні принципи оцінки еквівалентності лікарських засобів в Україні [Електронний ресурс]. Аптека.ua. Режим доступу: <https://www.apteka.ua/article/431229>
4. Accurate clinical toxicity prediction using multi-task deep neural networks [Електронний ресурс]. 2022. Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/2204.06614>
5. European Congress of Scientific Achievements: матеріали конференції (2024) [Електронний ресурс]. Режим доступу: <https://sci-conf.com.ua>
6. Quantitative in vitro to in vivo extrapolation for human toxicology and drug development [Електронний ресурс]. 2024. Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/2401.03277>

<sup>1</sup>Овчиннікова Є.П., <sup>1</sup>Москаленко О. В., <sup>1,2</sup>Суховєєв В.В.

<sup>1</sup>*Кафедра хімії та фармації, Ніжинський державний університет  
імені Миколи Гоголя, Ніжин, Україна*

<sup>2</sup>*Відділ хімії біоактивних азотовмісних гетероциклічних основ,  
Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії імені В.П. Кухаря НАН України*

## ТЕХНОЛОГІЧНІ АСПЕКТИ СТВОРЕННЯ СТАБІЛЬНОЇ ПІННОЇ СИСТЕМИ З ВЕНОТОНІЧНОЮ ДІЄЮ НА ОСНОВІ ПЛОДІВ *AESCULUS HIPPOCASTANUM L.*

У статті розглянуті деякі технологічні аспекти створення пінної системи з венотонічною дією на основі плодів гіркокаштану звичайного (*Aesculus hippocastanum L.*). Встановлено, що оптимальним піноутворювачем є цукровий децилглюкозид C<sub>8</sub>–C<sub>14</sub> у поєднанні з кокамідопропілбетаїном у співвідношенні 2:1 та загальною концентрацією у системі 6%. Для стабілізації піни у систему введено молочну кислоту до досягнення рН середовища 5,5.

**Ключові слова:** стабільна пінна система, плоди гіркокаштану звичайного, венотонічна дія.

The article discusses some technological aspects of creating a foam system with a venotonic effect based on the fruits of horse chestnut (*Aesculus hippocastanum L.*). It was found that the optimal foaming agent is sugar decylglucoside C<sub>8</sub>–C<sub>14</sub> in combination with cocamidopropyl betaine in a ratio of 2:1 and a total concentration in the system of 6%. To stabilize the foam, lactic acid was introduced into the system until the pH of the medium reached 5.5.

**Keywords:** stable foam system, common horse chestnut fruits, venotonic effect.