

DOI <https://doi.org/10.32689/2663-0672-2026-1-13>  
УДК 547.673

## ПРОГНОЗУВАННЯ ЛІКОПОДІБНОСТІ ТА ТОКСИЧНОСТІ РЯДУ ФУНКЦІОНАЛЬНО ЗАМІЩЕНИХ ПОХІДНИХ АНТРАХІНОНУ

Шупенюк В. І., Хома Р. М., Тарас Т. М., Лучкевич Є. Р., Лозинський А. В.,  
Половкович С. В.

### PREDICTION OF DRUG-LIKENESS AND TOXICITY OF A SERIES OF FUNCTIONALLY SUBSTITUTED ANTHRAQUINONE DERIVATIVES

Vasyl Shupeniuk, Roman Khoma, Tetiana Taras, Yevhen Luchkevych,  
Andrii Lozynskyi, Sviatoslav Polovkovych

#### Анотація

**Актуальність.** Похідні антрахінону є перспективними біологічно активними сполуками з широким спектром фармакологічної дії. Використання сучасних *in silico* методів для прогнозування лікоподібності, токсичності та механізмів дії дозволяє ефективно відбирати перспективні сполуки для подальших експериментальних досліджень і створення нових лікарських засобів. **Мета роботи.** Здійснити прогнозування лікоподібності та токсичності функціонально заміщених похідних антрахінону, а також оцінити можливі механізми їх біологічної активності з використанням сучасних *in silico* підходів. **Матеріали та методи.** Дослідження проведено із застосуванням комп'ютерного скринінгу з використанням веб-ресурсів SwissADME, SwissTargetPrediction та ProTox II для оцінки лікоподібних властивостей і токсичності досліджуваних сполук. Для прогнозування можливих механізмів біологічної дії використано відповідні біоінформатичні інструменти. Аналіз здійснювали з урахуванням фізико-хімічних параметрів, біодоступності, проникності через біологічні мембрани та потенційних токсикологічних ризиків. **Результати та їх обговорення.** Встановлено, що функціонально заміщені похідні антрахінону характеризуються задовільними показниками лікоподібності, зокрема відповідністю основним фармакокінетичним критеріям, а також помірним або низьким рівнем прогнозованої токсичності. Прогнозовані механізми дії узгоджуються з виявленими таргетними профілями та свідчать про потенційний вплив на GPCR-опосередковані сигнальні шляхи й ферменти метаболічної регуляції. Отримані результати обґрунтовують перспективність досліджуваних сполук як потенційних біологічно активних агентів і доцільність подальших експериментальних досліджень для підтвердження їх механізмів дії. **Висновки.** Отримані результати свідчать про перспективність функціонально заміщених похідних антрахінону як потенційних біологічно активних сполук із сприятливим профілем лікоподібності та токсичності. Проведене дослідження створює підґрунтя для подальшої оптимізації структури сполук та їх експериментального вивчення з метою розробки нових лікарських засобів.

**Ключові слова:** антрахінони, лікоподібність, токсичність, *in silico*, SwissADME, SwissTargetPrediction, ProTox II, біологічна активність.

#### Abstract

**Background.** Anthraquinone derivatives are promising biologically active compounds with a broad spectrum of pharmacological activities. The use of modern *in silico* methods for predicting drug-likeness, toxicity, and mechanisms of action enables the efficient selection of promising compounds for further experimental studies and the development of new therapeutic agents. **Purpose.** This study aimed to predict the drug-likeness and toxicity of functionally substituted anthraquinone derivatives, as well as to evaluate the possible mechanisms of their biological activity using modern *in silico* approaches. **Materials and Methods.** The study was performed using computational screening based on the web resources SwissADME, SwissTargetPrediction, and ProTox-II to assess the drug-likeness and toxicity profiles of the investigated compounds. Relevant bioinformatics tools were applied to predict potential mechanisms of biological action. The analysis included evaluation of physicochemical parameters, bioavailability, membrane permeability, and potential toxicological risks. **Results.** It has been established that functionally substituted anthraquinone derivatives are characterized by satisfactory drug-likeness parameters, in particular compliance with key pharmacokinetic criteria, as well as moderate to low predicted toxicity. The predicted mechanisms of action are consistent with the identified target profiles and indicate a potential influence on GPCR-mediated signaling pathways and metabolic regulatory enzymes. The obtained results substantiate the perspective of the studied compounds as potential biologically active agents and justify further experimental studies to confirm their mechanisms of action. **Conclusions.** The obtained results indicate that functionally substituted anthraquinone derivatives are promising biologically active compounds with a favorable drug-likeness and toxicity profile. The present study provides a basis for further structural optimization and experimental validation aimed at the development of new therapeutic agents.

**Key words:** anthraquinones, drug-likeness, toxicity, *in silico*, SwissADME, SwissTargetPrediction, ProTox-II, biological activity.



## 1. Вступ

Похідні антрахінону є важливим класом природних і синтетичних органічних сполук, які привертають значну увагу дослідників завдяки широкому спектру біологічної активності. Історично інтерес до цієї групи речовин сформувався на основі їх природного походження, передусім із лікарських рослин, що здавна використовувалися в традиційній медицині різних народів [1].

Основними рослинними джерелами антрахінонових сполук є представники родин *Rhamnaceae*, *Polygonaceae*, *Fabaceae* та *Rubiaceae*. Зокрема, такі рослини як ревіль (*Rheum spp.*), жостір (*Rhamnus spp.*), крушина (*Frangula alnus*), сенна (*Senna alexandrina*) та марена красильна (*Rubia tinctorum*) містять значні кількості антрахінонових глікозидів [2]. Ці сполуки виконують захисні функції у рослинах, а для людини мають фармакологічну цінність, зокрема як послаблювальні засоби, що діють шляхом стимуляції перистальтики кишечника та впливу на водно-електролітний баланс [3].

На основі природних антрахінонів створено низку лікарських засобів, які широко застосовуються у медичній практиці. Найбільш відомими є препарати сеннозидів (сенаде, сенадексин), екстракти крушини та ревеню, що використовуються як проносні засоби. Окрім цього, окремі похідні антрахінону демонструють протизапальну, антибактеріальну, протівірусну та протипухлинну активність. Важливим прикладом є антрациклінові антибіотики (зокрема доксорубіцин, даунорубіцин), які є потужними протипухлинними препаратами та широко використовуються в онкології [4].

Сучасний етап розвитку фармацевтичної хімії характеризується активним синтезом нових похідних антрахінону з метою підвищення їх біологічної активності та зменшення токсичності. Синтетичні модифікації антрахінонового ядра дозволяють отримувати сполуки з різноманітними фармакологічними властивостями, включаючи антиоксидантну, антимікробну, протипухлинну та

інгібуючу дію щодо ферментів і сигнальних шляхів клітини [5]. Особливу увагу приділяють створенню сполук із селективною цитотоксичністю до пухлинних клітин, а також дослідженню їх механізмів дії на молекулярному рівні [6].

Таким чином, похідні антрахінону становлять перспективний напрям сучасних фармацевтичних досліджень, поєднуючи природне походження, доведену фармакологічну активність і широкі можливості для хімічної модифікації з метою створення нових ефективних лікарських засобів.

**Метою дослідження** є прогнозування лікоподібності та токсичності функціонально заміщених похідних антрахінону, а також оцінка можливих механізмів їх біологічної дії із застосуванням сучасних *in silico* підходів.

## 2. Матеріали та методи дослідження

Для прогнозування параметрів «лікоподібності» використано ряд функціонально заміщених похідних антрахінону (рис. 1), синтез та фізико-хімічні характеристики яких були описані раніше [7]. Оцінювання молекулярних дескрипторів, що визначають лікоподібність сполук, здійснювали з використанням веб-ресурсу SwissADME, тоді як прогнозування потенційних біологічних мішеней проводили за допомогою сервісу SwissTargetPrediction (Швейцарський інститут біоінформатики) [8,9].

Прогнозування токсикологічного профілю досліджуваних сполук виконували із застосуванням платформи ProTox-II (Charité – Universitätsmedizin Berlin), що дозволяє оцінювати ймовірні токсичні ефекти *in silico* [10].

## 3. Результати

У ході дослідження було здійснено комплексний *in silico* аналіз функціонально-заміщених похідних антрахінонів (сполуки 1–5) з метою оцінки їх фізико-хімічних, фармакокінетичних властивостей, параметрів ADME та характеристик лікоподібності. Отримані результати свідчать про суттєві відмінності між досліджуваними структурами,

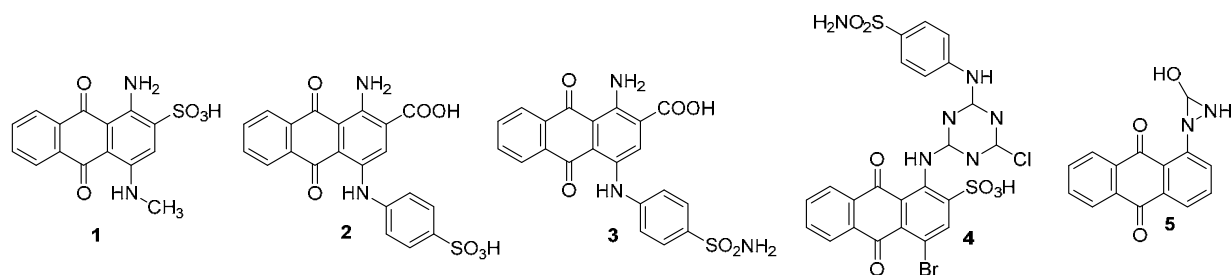


Рис. 1. Структури досліджуваних сполук

що зумовлено як їх молекулярною будовою, так і ступенем функціонального заміщення (табл. 1). Далі наведено узагальнений аналіз фізико-хімічних показників та біофармацевтичних характеристик сполук 1–5.

Молекулярна маса досліджуваних сполук варіює в межах від 265.24 до 668.90 г/моль, при цьому лише сполука 4 перевищує рекомендовані межі, що узгоджується з порушенням правила Ліпінського. Кількість важких атомів (20–40) та ароматичних фрагментів (12–18) вказує на високий ступінь ароматичності, характерний для антрахінонового ядра. Число зв'язків, що обертаються (1–6), свідчить про відносно обмежену конформаційну гнучкість більшості сполук.

Полярні характеристики представлені значеннями TPSA у діапазоні 79.09–189.49 Å<sup>2</sup>, що суттєво впливають на біодоступність та проникність через біологічні мембрани. Зокрема, сполуки 2–4 мають підвищені значення TPSA (>170 Å<sup>2</sup>), що корелює з їх низькою гастроінтестинальною абсорбцією. Натомість сполуки 1 і 5 демонструють кращий баланс полярності та ліпофільності (log Po/w 1.46 та 0.90 відповідно), що сприяє їх високій абсорбції.

Аналіз донорно-акцепторних властивостей показав, що кількість донорів протону (4–11) та акцепторів (1–4) загалом відповідає вимогам лікоподібності, за винятком сполуки 4, яка має надлишкову кількість донорних центрів. Узгоджена ліпофільність (log Po/w) для більшості сполук знаходиться у прийнятному діапазоні, тоді як для сполуки 4 спостерігається

аномально низьке значення (-6.47), що вказує на її високу гідрофільність і потенційно обмежену мембранну проникність.

Фармакокінетичний аналіз показав, що лише сполуки 1 та 5 характеризуються високою гастроінтестинальною абсорбцією, тоді як інші сполуки мають низьку біодоступність, що підтверджується відповідними значеннями параметра біодоступності (0.11–0.17). Жодна зі сполук не проникає через гематоенцефалічний бар'єр. Водночас сполуки 4 і 5 ідентифіковані як субстрати P-gp.

Показники шкірної проникності (Log Kp) знаходяться в межах від -6.24 до -9.91 cm/s.

Додатковий аналіз емпіричних правил лікоподібності (Lipinski, Ghose, Veber, Egan, Muegge) показав, що сполуки 1 та 5 повністю відповідають усім зазначеним критеріям (з незначним винятком для сполуки 1 за правилом Egan). Натомість для сполук 2 та 3 зафіксовано порушення правил Veber, Egan та Muegge, тоді як сполука 4 не відповідає жодному з основних критеріїв лікоподібності.

Показники біодоступності для сполук 1 і 5 становлять близько 0.55–0.56, тоді як для сполук 2–4 – 0.11–0.17. Аналіз медико-хімічних фільтрів виявив наявність PAINS-індикаторів для всіх сполук. Водночас сполука 5 характеризується профілем без Brenk-індикаторів.

Критерій лікоподібності виконується для сполук 1 та 5. Показники синтетичної доступності (3.0–5.1) свідчать про загалом

Таблиця 1

**Фізико-хімічні показники, параметри ADME, фармакокінетичні властивості, параметри лікоподібності сполук 1-5**

	1	2	3	4	5
Фізико-хімічні властивості					
Молекулярна маса	332.33	438.41	437.43	668.90	265.24
Число важких атомів	23	31	31	40	20
Число ароматичних важких атомів	12	18	18	18	12
Число зв'язків, що обертаються	2	4	4	6	1
Число донорів протону	5	7	7	11	4
Число акцепторів протону	3	4	4	4	1
Молярна рефрактерність	83.32	110.52	111.65	155.99	76.89
TPSA Å <sup>2</sup>	134.94	172.24	178.03	189.49	79.09
Узгоджена log Po/w	1.46	1.88	1.62	-6.47	0.90
Правило Ліпінського	Так	Так	Так	Ні	Так
Фармакокінетичні параметри					
Гастроінтестинальна абсорбція	Висока	Низька	Низька	Низька	Висока
Проникність через ГЕБ	Ні	Ні	Ні	Ні	Ні
P-gp субстрат	Ні	Ні	Ні	Так	Так
Log Kp (SP) (cm/s) (шкірна проникність)	-6.24	-6.77	-6.90	-9.91	-6.32
Параметр біодоступності	0.56	0.11	0.11	0.17	0.55

прийнятну складність синтезу, за винятком сполуки 4.

Продовжуючи вивчення функціонально-заміщених антрахінонів, нами було проведено оцінку потенційних біологічних мішеней для сполук 1–5 із використанням *in silico* підходу за допомогою веб-сервісу SwissSimilarity. Отримані результати свідчать про суттєві відмінності у таргетному профілі досліджуваних сполук (табл. 2).

Для сполук 1–3 встановлено наявність узгодженого поліфармакологічного профілю з переважною взаємодією з рецепторами родини G-білок-спряжених рецепторів, зокрема пуринергічними рецепторами P2Y12 та P2Y1, а також ендотеліновими

рецепторами типу А та В. Найвища ймовірність взаємодії спостерігається для P2Y12-рецептора. Окрім цього, для окремих сполук виявлено взаємодію з ферментами FBP1, PFKFB3 та карбоангідразою II.

Для сполуки 4 значущих біологічних мішеней не виявлено. Аналогічно, для сполуки 5 не встановлено достовірних біологічних мішеней.

Прогнозування пероральної токсичності досліджуваних сполук було здійснено з використанням веб-сервісу ProTox-II. Отримані результати (табл. 3) свідчать, що сполуки 1–5 належать до V–VI класів токсичності згідно з класифікацією OECD, із розрахунковими значеннями LD<sub>50</sub> у межах 3350–6700 мг/кг.

Таблиця 2

### Порівняльний аналіз прогнозованих біологічних мішеней для сполук 1–5 (SwissSimilarity)

Сполука	Домінуючий напрям дії	Ключові мішені	Клас мішеней	Загальний профіль
1	Пуринергічна система	P2Y12, P2Y1, ENTPD1	сигнальні GPCR-рецептори та ферментні системи	Пуринергічний/антиагрегантний тип
2	G-білок-спряжена рецепторна сигналізація та метаболічна регуляція	P2Y12, FBP1, PFKFB3, CA2	GPCR-залежні сигнальні білки та метаболічні ферменти	Змішаний GPCR-метаболічний профіль
3	G-білок-спряжена рецепторна сигналізація, пов'язана з регуляцією судинного тону	P2Y12, EDNRA, EDNRB, ADAMTS4	GPCR-залежні сигнальні білки та протеолітичні ферменти	Кардіоваскулярний/ендотелін-залежний профіль
4	Слабкий кіназний сигнал	MAP2K1, FLT3, CHEK2 (0.0)	кіназні мішені з низькою ймовірністю взаємодії	Гіпотетичний антипроліферативний профіль
5	Розрізнений профіль з низькою прогноною достовірністю	CXCR3, MAOA, CYP1A2	Змішані ферменти/рецептори	Неспецифічний/поза доменом моделі

Таблиця 3

### Результати прогнозування токсичності сполук 1-5 сервісом ProTox II

		1	2	3	4	5
LD <sub>50</sub> (мг/кг)		3350	6700	3660	6700	5000
Клас токс.		5	6	5	6	5
Тип токсичності	Гепатотоксичність	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Активна
	Нейротоксичність	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Активна	Активна
	Нефротоксичність	Неактивна	Активна	Активна	Активна	Активна
	Респіраторна токсичність	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Активна	Активна
	Кардіотоксичність	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Неактивна
	Імунотоксичність	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Активна	Неактивна
	Мутагенність	Активна	Активна	Неактивна	Неактивна	Активна
	Цитотоксичність	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Активна
	Екотоксичність	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Активна
	Клінічна токсичність	Активна	Активна	Активна	Неактивна	Активна
Нутритивна токсичність	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Неактивна	Активна	

Найменш токсичними виявилися сполуки **2** та **4** ( $LD_{50} = 6700$  мг/кг, VI клас), тоді як для інших сполук характерні дещо нижчі значення  $LD_{50}$  (V клас). Аналіз профілю органоспецифічної токсичності показав, що нефротоксичність прогнозується для більшості досліджуваних сполук (**2–5**), тоді як нейротоксичність і респіраторна токсичність характерні переважно для сполук **4** і **5**. Мутагенний потенціал виявлено для сполук **1**, **2** та **5**.

Особливої уваги заслуговує сполука **5**, яка демонструє найширший спектр прогнозованих токсичних ефектів, включаючи гепато-, нейро-, нефро- та респіраторну токсичність, а також цитотоксичність і екотоксичність.

#### 4. Обговорення

Отримані результати свідчать, що функціонально-заміщені похідні антрахінонів характеризуються різними фізико-хімічними та фармакокінетичними властивостями, що визначаються ступенем функціонального заміщення та полярністю молекул. Підвищені значення TPSA для сполук **2–4** корелюють із низькою гастроінтестинальною абсорбцією та біодоступністю, тоді як сполуки **1** і **5** демонструють більш сприятливий баланс полярності та ліпофільності.

Порушення емпіричних правил лікоподібності для сполуки **4** узгоджується з її високою молекулярною масою, значною полярністю та несприятливими фармакокінетичними параметрами. Натомість відповідність сполук **1** та **5** основним критеріям лікоподібності вказує на їх перспективність як вихідних структур для подальшої оптимізації.

Встановлена взаємодія сполук **1–3** з GPCR-рецепторами, зокрема P2Y<sub>12</sub> та P2Y<sub>1</sub>, може свідчити про потенційну антиагрегантну активність досліджуваних сполук. Наявність мішеней, пов'язаних із регуляцією судинного тонусу (EDNRA, EDNRB), дозволяє припустити можливий вплив на кардіоваскулярну систему. Виявлення взаємодії з ферментами, залученими до метаболічних процесів, може свідчити про потенційний вплив сполук на енергетичний обмін клітин.

Для сполуки **4** серед потенційних білків переважають кінази (MAP2K1, CHEK2, FLT3), а також ферменти, пов'язані з процесами синтезу ДНК та регуляції клітинного циклу. Це може вказувати на можливу спрямованість сполуки на проліферативні процеси, однак такі результати мають виключно гіпотетичний характер і потребують подальшого експериментального підтвердження.

Відсутність узгодженого таргетного профілю для сполуки **5** може свідчити про структурну новизну сполуки або її низьку подібність до відомих біологічно активних молекул.

Варто відзначити, що афінність антрахінонів до GPCR-опосередкованих сигнальних шляхів певною мірою підтверджується експериментальними даними, згідно з якими G-білки беруть участь у регуляції біосинтезу антрахінонів у *Rubia tinctorum* L. через активацію PLC/РКС, PI3K, MAPK та Ca<sup>2+</sup>-залежних сигнальних каскадів. Показано, що агоністи G-білків індують накопичення антрахінонів, тоді як їх інгібітори блокують цей ефект, що вказує на участь G-білок-залежної трансдукції сигналу [11].

Загалом, отримані результати свідчать про відносно сприятливий профіль гострої токсичності досліджуваних сполук, однак наявність окремих видів потенційної токсичності обґрунтовує доцільність подальших експериментальних досліджень *in vitro* та *in vivo* для підтвердження їх безпечності.

#### 5. Висновки

За результатами комплексного *in silico* аналізу, що включав оцінку фізико-хімічних параметрів, ADME-характеристик, фармакокінетичних властивостей і показників лікоподібності, а також ймовірних механізмів фармакологічної дії, встановлено, що досліджувані сполуки характеризуються перспективним біологічним профілем. Отримані результати обґрунтовують доцільність подальших поглиблених досліджень функціоналізованих похідних антрахінону як потенційних лікоподібних молекул.

**Перспективи подальших досліджень.** Отримані *in silico* результати створюють підґрунтя для подальшого експериментального підтвердження біологічної активності функціонально-заміщених похідних антрахінону. Перспективним є проведення *in vitro* досліджень для валідації прогнозованих молекулярних мішеней. Доцільним є також структурне вдосконалення сполук з метою покращення їх ADME-профілю та зниження полярності для підвищення біодоступності.

**Обмеження дослідження.** Дослідження базується виключно на *in silico* підходах, що обмежує можливість прямого екстраполювання результатів на біологічні системи *in vivo*. Прогнозовані показники лікоподібності, токсичності та таргетної взаємодії мають ймовірнісний характер і потребують експериментального підтвердження. Також обмеженням

є залежність результатів від доступних навчальних вибірок алгоритмів SwissADME, SwissTargetPrediction та ProTox-II.

### Конфлікт інтересів

Автори декларують відсутність конфлікту інтересів.

### Використання штучного інтелекту

У процесі підготовки роботи елементи штучного інтелекту використовувалися для допоміжного редагування наукового тексту. Штучний інтелект не застосовувався для генерації первинних наукових даних, розрахунків або отримання результатів *in silico* аналізу, які були виконані із використанням спеціалізованих веб-ресурсів та інструментів.

### Первинні дані та матеріали

Первинні дані дослідження були отримані в результаті *in silico* аналізу функціонально-заміщених похідних антрахінону із використанням веб-сервісів SwissADME, SwissTargetPrediction та ProTox-II. Вхідними матеріалами були хімічні структури досліджуваних сполук (SMILES-формат). Усі розрахункові показники (ADME-параметри,

прогноз токсичності та таргетні взаємодії) базуються на результатах роботи зазначених алгоритмічних платформ і були систематизовані та проаналізовані автором.

### Інформація про фінансування

Ця робота була підтримана Національним фондом досліджень України в межах проєктів № 2023.05/0021, 2025.02/0014, 2025.05/0026; науково-дослідним (дослідно-конструкторським) проєктом № 0125U003375; Міністерством освіти і науки України (реєстраційний номер: 0125U001794), Міністерством охорони здоров'я України (реєстраційні номери: 0126U001771, 0126U001827).

### Внесок авторів

Концепція: Василь Шупенюк, Тетяна Тарас, Євген Лучкевич, Андрій Лозинський, Святослав Половкович.

Збирання та опрацювання даних: Василь Шупенюк, Роман Хома.

Написання статті: Роман Хома, Андрій Лозинський.

Редагування та затвердження остаточного варіанту статті: Роман Хома, Андрій Лозинський.

## REFERENCES

- Diaz-Munoz, G., Miranda, I. L., Sartori, S. K., de Rezende, D. C., & Diaz, M. A. (2018). Anthraquinones: An overview. *Studies in Natural Products Chemistry*, 58, 313–338. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-64056-7.00011-8>
- Wang, P., et al. (2024). Plant anthraquinones: Classification, distribution, biosynthesis, and regulation. *Journal of Cellular Physiology*, 239(10), e31063. <https://doi.org/10.1002/jcp.31063>
- Malik, E. M., & Müller, C. E. (2016). Anthraquinones as pharmacological tools and drugs. *Medicinal Research Reviews*, 36(4), 705–748. <https://doi.org/10.1002/med.21391>
- Siddamurthi, S., et al. (2020). Anthraquinone: A promising scaffold for the discovery and development of therapeutic agents in cancer therapy. *Future Medicinal Chemistry*, 12(11), 1037–1069. <https://doi.org/10.4155/fmc-2019-0198>
- Lozynskiy, A., et al. (2021). Synthesis and biological activity evaluation of polyfunctionalized anthraquinonehydrazones. *Letters in Drug Design & Discovery*, 18(2), 199–209. <https://doi.org/10.2174/1570180817999200802032844>
- Malik, M. S., et al. (2021). Journey of anthraquinones as anticancer agents – a systematic review of recent literature. *RSC Advances*, 11(57), 35806–35827. <https://doi.org/10.1039/D1RA05686G>
- Shupeniuk, V. I. (2023). *Synthesis and properties of 4-substituted derivatives of 9,10-anthracenedione* (Doctoral dissertation). Lviv Polytechnic National University.
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific Reports*, 7, 42717. <https://doi.org/10.1038/srep42717>
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2019). SwissTargetPrediction: Updated data and new features for efficient prediction of protein targets of small molecules. *Nucleic Acids Research*, 47(W1), W357–W364. <https://doi.org/10.1093/nar/gkz382>
- Banerjee, P., et al. (2018). ProTox-II: A webserver for the prediction of toxicity of chemicals. *Nucleic Acids Research*, 46(W1), W257–W263. <https://doi.org/10.1093/nar/gky318>
- Vasconsuelo, A., et al. (2006). Involvement of G-proteins in chitosan-induced anthraquinone synthesis in *Rubia tinctorum*. *Physiologia Plantarum*, 128(1), 29–37. <https://doi.org/10.1111/j.1399-3054.2006.00717>
- Wilhelm, K. P., & Maibach, H. I. (2012). OECD guidelines for testing of chemicals. In *Dermatotoxicology* (pp. 509–511). CRC Press. <https://doi.org/10.3109/9781841848570>

## ВІДОМОСТІ ПРО АВТОРІВ

Англ.

**Shupeniuk Vasyl**

Candidate of Chemical Sciences, Assistant Professor

*Vasyl Stefanyk Carpathian National University**vasyl.shupeniuk@pnu.edu.ua*

ORCID: 0000-0003-3965-2201

**Khoma Roman**

Postgraduate Student

*State Nonprofit Company Danylo Halytsky Lviv**National Medical University**elektromet@elektromet.com.ua*

ORCID: 0009-0007-5076-6628

**Taras Tetiana**

Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor

*Vasyl Stefanyk Carpathian National University**tatiana.taras@pnu.edu.ua*

ORCID: 0000-0002-5801-1285

**Luchkevych Yevhen**

Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor

*Vasyl Stefanyk Carpathian National University**yevhen.luchkevych@pnu.edu.ua*

ORCID: 0000-0002-3007-8437

**Lozynskiy Andrii**

Doctor of Pharmaceutical Sciences, Professor

*State Nonprofit Company Danylo Halytsky Lviv**National Medical University**lozynskiyandrii@gmail.com*

ORCID: 0000-0001-7151-2159

**Sviatoslav Polovkovych,**

Doctor of Chemical Sciences, Professor

*Lviv Polytechnic National University**spolovkovych@ukr.net*

ORCID: 0000-0002-7143-6931

Укр.

**Шупенюк Василь Ігорович**

кандидат хімічних наук, асистент

*Карпатський національний університет**імені Василя Стефаника**vasyl.shupeniuk@pnu.edu.ua*

ORCID: 0000-0003-3965-2201

**Хома Роман Михайлович**

аспірант

*Державне некомерційне товариство**«Львівський національний медичний**університет імені Данила Галицького»**elektromet@elektromet.com.ua*

ORCID: 0009-0007-5076-6628

**Тарас Тетяна Миколаївна**

кандидат хімічних наук, доцент

*Карпатський національний університет**імені Василя Стефаника**tatiana.taras@pnu.edu.ua*

ORCID: 0000-0002-5801-1285

**Лучкевич Євген Романович**

кандидат хімічних наук, доцент

*Карпатський національний університет**імені Василя Стефаника**yevhen.luchkevych@pnu.edu.ua*

ORCID: 0000-0002-3007-8437

**Лозинський Андрій Володимирович**

доктор фармацевтичних наук, професор

*Державне некомерційне товариство**«Львівський національний медичний**університет імені Данила Галицького»**lozynskiyandrii@gmail.com*

ORCID: 0000-0001-7151-2159

**Половкович Святослав Володимирович**

доктор хімічних наук, професор

*Національний університет**«Львівська політехніка»**spolovkovych@ukr.net*

ORCID: 0000-0002-7143-6931

Дата надходження статті: 16.03.2026

Дата надходження виправленої версії статті: 30.03.2026

Дата прийняття статті: 07.04.2026

Дата публікації статті: 05.06.2026