

3. Якубке, Х.-Д. Аминокислоты Пептиды Белки: пер. с нем. / Х.-Д. Якубке, Х. Ешкайт, Москва : «Мир», 1985. – 455 с.
4. Бек М. Исследование комплексообразования новейшими методами. / М. Бек, И. Надьпал. – Москва : Мир, 1989. – 413 с.

#### **Сведения об авторах**

А.А. Кузнецов\* – студент

М.А. Косарева – кандидат химических наук, доцент

Н.А. Белоконова – доктор технических наук, кандидат химических наук, доцент

#### **Information about the authors**

A.A. Kuznetsov\* – student

M.A. Kosareva – Candidate of Sciences (Chemistry), Associate Professor

N.A. Belokonova – Doctor of Sciences (Technical), Candidate of Sciences (Chemistry), Associate Professor

**\*Автор, ответственный за переписку (Corresponding author):**

aleksandrkuzesov@yandex.ru

УДК 615.4

### **ВОПРОСЫ ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ КАРТ ШУХАРТА**

Александр Михайлович Мельников, Ольга Александровна Мельникова

Кафедра управления экономики, фармации и химии

ФГБОУ ВО «Уральский государственный медицинский университет»

Министерства здравоохранения РФ

Екатеринбург, Россия

#### **Аннотация**

**Введение.** В современном исследовании статистическая обработка данных имеет большое значение в получении правильных результатов исследований. Данные методы позволяют улучшить качество исследований с помощью методов статистики.

**Цель исследования** – рассмотреть влияние статистической обработки данных на мягких лекарственных формах.

**Материал и методы.** Был проведен статистический анализ мягкой лекарственной формы на основе диоксометилтетрагидропиримидина.

**Результаты.** Были взяты данные из лабораторного исследования и произведены расчеты по нижним и верхним границам значений, а также произведен расчет размаха первичных данных. **Выводы.** Данный статистический метод соответствует для анализа данной лекарственной формы.

**Ключевые слова:** карта Шухарта, статистическая обработка, анализ мягкой лекарственной формы.

### **ISSUES OF PROCESSING MEASUREMENT RESULTS USING SHUKHART CHARTS**

Alexander M. Melnikov, Olga A. Melnikova

Department of Management of Economics, Pharmacy and Chemistry,

Ural state medical university

Yekaterinburg, Russia

## Annotation

**Introduction.** In modern research, statistical data processing is of great importance in obtaining the correct research results. These methods make it possible to improve the quality of research using statistical methods. **The purpose of the study** is to consider the impact of statistical data processing on soft dosage forms. **Material and methods.** A statistical analysis of the soft dosage form based on dioxomethyltetrahydropyrimidine was carried out. **Results.** Data were taken from a laboratory study and calculations were made for the lower and upper limits of the values, as well as the calculation of the range of primary data. **Conclusions.** This statistical method is appropriate for the analysis of this dosage form.

**Keywords:** Shewhart map, statistical processing, soft dosage form analysis.

## ВВЕДЕНИЕ

В любом фармацевтическом исследовании важным этапом является статистическая обработка результатов. Статистические методы позволяют проводить рациональные количественные исследования, оценивать системы процессов и принимать в результате важные управленческие решения. Статистический контроль относится к метрологическим измерениям и направлен на контроль выбросов и улучшения качества процессов с помощью статистики. Впервые карты были представлены Уолтером Шухартом в 1920 годах. Контрольные карты являются одним из самых популярных инструментов для мониторинга процессов, связанных с качеством. Однако, несмотря на то что придуманы они уже давно и регламентированы множеством нормативных актов, их применение к фармацевтическим объектам является ограниченным.

**Цель исследования** - применение карт Шухарта к мягким лекарственным формам

## МАТЕРИАЛ И МЕТОДЫ

В качестве объектов исследования была выбрана лекарственная форма, на основе nano частиц, имеющая следующий состав на 100 гр лекарственной формы: действующее вещество диоксометилтетрагидропиримидин – 10 г (10%) (ФС-001740) системы доставки с магнитным откликом. Наночастицы  $Fe_3O_4$  - 0,100 г (0,1%), размер наночастиц 40нм. Вспомогательные вещества ланолин – 45 г (ТУ 9154-015-00333865-05), вазелин безводный 31,5 г (ГОСТ 3582-84), Вода очищенная 13,5 гр (ФС.2.2.0020.18). Количественное определение проводили методом спектрофотометрии.

## РЕЗУЛЬТАТЫ

Существует много видов контрольных карт (см., например, ГОСТ Р 50779.42-99. Статистические методы. Контрольные карты Шухарта). Но основных – два: карта средних и индивидуальных значений. Если контролируемый процесс устроен так, что некоторые значения образуют естественные группы, то рекомендуется использовать контрольную карту средних. Результаты количественного определения представлены в таблице 1

Таблица 1

Результаты количественного определения

$\bar{X}$	$\bar{\bar{X}}$	$UCL_{\bar{X}}$	$LCL_{\bar{X}}$	R	$\bar{R}$	$UCL_R$
1	2	3	4	5	6	7
10,13	9,64	2,59442	8,922247	2	0,98	2,23636
9,65	9,64	10,35109	8,922247	0,4	0,98	2,23636
9,70	9,64	10,35109	8,922247	0,5	0,98	2,23636
9,75	9,64	10,35109	8,922247	0,6	0,98	2,23636
9,73	9,64	10,35109	8,922247	0,5	0,98	2,23636
9,75	9,64	10,35109	8,922247	0,5	0,98	2,23636
9,80	9,64	10,35109	8,922247	0,3	0,98	2,23636
9,88	9,64	10,35109	8,922247	0,1	0,98	2,23636
9,95	9,64	10,35109	8,922247	0,3	0,98	2,23636
10,00	9,64	10,35109	8,922247	0,5	0,98	2,23636
9,75	9,64	10,35109	8,922247	0,5	0,98	2,23636
9,65	9,64	10,35109	8,922247	0,6	0,98	2,23636
9,65	9,64	10,35109	8,922247	0,8	0,98	2,23636
9,68	9,64	10,35109	8,922247	1,1	0,98	2,23636
7,50	9,64	10,35109	8,922247	6	0,98	2,23636

Примечание: \* - различия показателей статистически значимы ( $p < 0,05$ )

## ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим расчёты более подробно:

$\bar{X}$  — это изначальные данные, которые были взяты для данного исследования;

$\bar{\bar{X}}$  — это среднее по нескольким значениям средних  $\bar{X}$ , рассчитывается по следующей формуле: =СРЗНАЧ(\$A\$2:\$A\$15);

$UCL_{\bar{X}}$  — это верхняя граница карты средних значений, рассчитывается по следующей формуле:  $\bar{\bar{X}} + A_2\bar{R}$ , где:  $\bar{R}$  — среднее по размахам в нескольких выборках;  $\bar{\bar{X}}$  — среднее по нескольким значениям средних  $\bar{X}$ ;  $A_2$  — коэффициенты, зависящие от размера выборок;

$LCL_{\bar{X}} = \bar{\bar{X}} - A_2\bar{R}$  — нижняя граница карты средних; рассчитывается по следующей формуле:  $\bar{\bar{X}} - A_2\bar{R}$ , где:  $\bar{R}$  — среднее по размахам в нескольких выборках;  $\bar{\bar{X}}$  — среднее по нескольким значениям средних  $\bar{X}$ ;  $A_2$  — коэффициенты, зависящие от размера выборок;

R — это размах, входит в число изначальных данных;

$\bar{R}$  — среднее по размахам в нескольких выборках; Рассчитывается по формуле: = СРЗНАЧ(\$F\$2:\$F\$15);

$UCL_R = D_4\bar{R}$  — верхняя граница карты размахов, где  $D_4$  — коэффициенты, зависящие от размера выборок чисел;  $\bar{R}$  — среднее по размахам в нескольких выборках;

Таким образом исходя из расчетов получаем следующие графики:

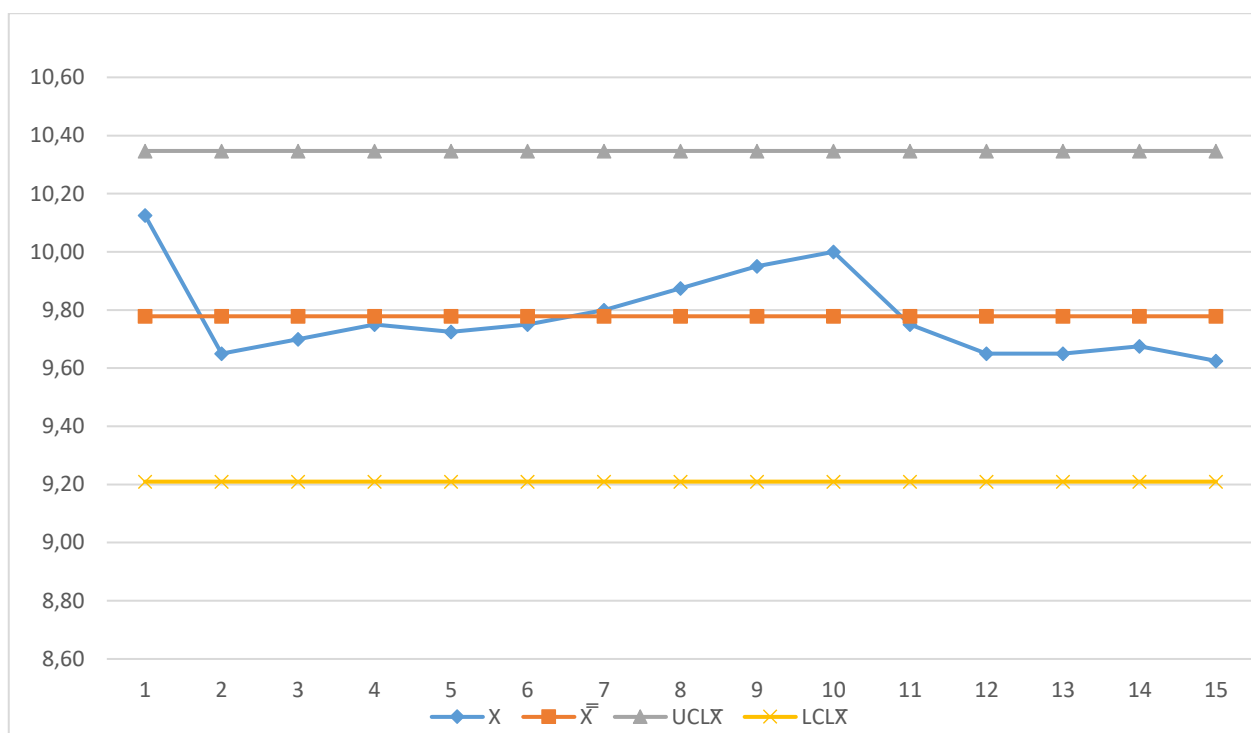


Рис. 1 Полученные статистические данные

## ВЫВОДЫ

Исходя из рассчитанных данных мы получили график количественного определения мягкой лекарственной формы на основе диоксометилтетрагидропиримидина. Из графика видно, что полученные результаты свидетельствуют, что карты Шухарта применимы к данной лекарственной формы. Вещество содержится в необходимом диапазоне.

## СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Терещенко, А. Г. Внутривлабораторный контроль качества результатов анализа с использованием лабораторной информационной системы [Электронный ресурс]: электронное издание / - 2-е изд. (электронное). - Москва: Бинум. Лаб. знаний, 2012. - 312 с.
2. Ахметзянова, А.Х., Орлова, А.А., Мельникова, О.А. Спектрофотометрическое определение диклофенака в мягкой лекарственной форме с наночастицами. Сборник: Актуальные вопросы современной медицинской науки и здравоохранения. Сборник статей VII Международной научно-практической конференции молодых ученых и студентов . Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уральский государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации; Научное общество молодых ученых и студентов. 2022. С. 2716-2719.
3. Максимкина, Е. А. Стандартизация и обеспечение качества лекарственных средств: учебное пособие для слушателей системы послевузовского образования по специальности 060500 (040500) - Фармация / - Москва: Медицина, 2008. - 252, [1] с.
4. Российская академия наук. Самарский научный центр. Известия Самарского научного центра Российской академии наук [Текст]: журнал / учредитель:

Президиум Самарского науч. центра РАН. - Самара: Самарский науч. центр РАН, 2000-. 2020, Т. 22, № 5 (97). - 2020. - 140 с.

5. Сертификация и стандартизация материалов и изделий = Certification and standardization of materials and products: монография / [В. Т. Прохорова и др.]; под общ. ред. В. Т. Прохорова; Федеральное агентство по образованию, Гос. образовательное учреждение высш. проф. образования "Южно-Российский гос. ун-т экономики и сервиса". - Шахты: ЮРГУЭС, 2009. - 332, [2] с.: ил.; 21 см.;

#### **Сведения об авторах**

А.М. Мельников\* – студент.

О.А. Мельникова – доктор фармацевтических наук, доцент.

#### **Information about authors**

A.M. Melnikov\* – student

O.A. Melnikova - Doctor of Pharmaceutical Sciences, Associate Professor.

\***Автор, ответственный за переписку (Corresponding author):**

alexMM2001@yandex.ru

**УДК 615.015.11**

### **ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗИМИДАЗОЛА С ВЫСОКОЙ ПЕРОРАЛЬНОЙ БИОДОСТУПНОСТЬЮ**

Ольга Юрьевна Муха, Лидия Владимировна Горюнова, Глеб Васильевич  
Придворов

ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения РФ  
Волгоград, Россия

#### **Аннотация**

**Введение.** Современные методы виртуального скрининга позволяют более эффективно проводить поиск биологически активных соединений. Наиболее простыми из них являются ряд правил и критериев для определения лекарственного подобия. **Цель исследования** - поиск биологически активных соединений среди производных бензимидазола с максимальной пероральной биодоступностью. **Материал и методы.** Отобрано 23 соединения из класса производных бензимидазола для анализа их биодоступности с помощью веб-сервиса SwissADME. **Результаты.** Установлено, что 12 из 23 соединений соответствуют «правилу пяти» Липинского, правилу Veber, критериям Ghose и Muegge. **Выводы.** Применение правил лекарственного подобия на этапе виртуального скрининга производных бензимидазола позволяет существенно сократить количество молекул для дальнейшего экспериментального исследования.

**Ключевые слова:** бензимидазолы, *in silico*, лекарственное подобие, ADMET.

### **VIRTUAL SCREENING BENZIMIDAZOLE DERIVATIVES WITH THE HIGHEST BIOAVAILABILITY**

Olga Y. Mukha, Lidia V. Goryunova, Gleb V. Pridvorov  
Volgograd state medical university