

УДК 543.61:581.135.51:665.52:582

<https://www.doi.org/10.34907/JPQAI.2024.31.66.006>

## КОМПЬЮТЕРНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ И КОНТРОЛЬ КАЧЕСТВА СОСТАВА ШАМПУНЯ ЛЕКАРСТВЕННОГО С ЭКСТРАКТАМИ *GINKGO BILOBA L.* И *ROSA ODORATA (ANDREWS) SWEET* НА ОСНОВЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО РАСЧЕТА И ЭЛЕМЕНТОВ ИСКУСТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

**Е.В. Ковтун**, канд. фарм. наук, доцент, Пятигорский медико-фармацевтический институт – филиал ФГБОУ ВО «ВолГМУ» г. Пятигорск, [elena.f.73@mail.ru](mailto:elena.f.73@mail.ru)

**Л.В. Погребняк**, канд. фарм. наук, доцент, Пятигорский медико-фармацевтический институт – филиал ФГБОУ ВО «ВолГМУ» г. Пятигорск, [lyurpins@yandex.ru](mailto:lyurpins@yandex.ru)

**А.В. Погребняк**, канд. фарм. наук, доктор хим. наук, профессор, Пятигорский медико-фармацевтический институт – филиал ФГБОУ ВО «ВолГМУ» г. Пятигорск, [pspa2010@yandex.ru](mailto:pspa2010@yandex.ru)

**А.А. Прокопов**, доктор хим. наук, зав. кафедрой общей и биорганической химии ГБОУ ВО «Московский государственный медико-стоматологический университет имени А.И. Евдокимова» Минздрава России, г. Москва, [pral@mail.ru](mailto:pral@mail.ru)

**А.П. Плетень**, доктор биол. наук, профессор кафедры биологической химии ГБОУ ВО «Московский государственный медико-стоматологический университет имени А.И. Евдокимова» Минздрава России, г. Москва, [pleatol@mail.ru](mailto:pleatol@mail.ru)

**Т.Ю. Татаренко-Козмина**, доктор биол. наук, профессор, зав. медицинской биологии с основами клеточной и молекулярной биотехнологии НОИ «Клиническая медицина им. Н.А. Семашко» ГБОУ ВО «Московский государственный медико-стоматологический университет имени А.И. Евдокимова» Минздрава России, г. Москва, [kosmtina025@gmail.com](mailto:kosmtina025@gmail.com)

**В.И. Зверева**, канд. фарм. наук, зав. лабораторией НИЛ «Разработки и внедрения инновационных лекарственных средств» Научно-образовательного института фармации им. К.М. Лакина ГБОУ ВО «Московский государственный медико-стоматологический университет имени А.И. Евдокимова» Минздрава России, г. Москва, [valentinca1988@mail.ru](mailto:valentinca1988@mail.ru)

---

В начале осени 2023 года произошло значительное событие в области обеспечения качества и стандартизации лекарственных средств: с 01.09.2023 в Государственную фармакопею Российской Федерации XV издания приказом Минздрава России от 20.07.2023 №377 введена статья ОФС.1.4.1.0041 «Шампунь лекарственные», согласно которой «шампунь лекарственные должны соответствовать общим требованиям ОФС «Лекарственные формы» [1]. Таким образом, в обширной группе жидких лекарственных форм (ЖЛФ) появился

новый полноправный участник. Изменение регламента качества шампуней лекарственных позволяет предположить, что инновационные методы разработки, применявшиеся ранее для получения других ЖЛФ, могут с успехом применяться и в случае дизайна состава шампуней лекарственных. Соответственно, ситуация с разработкой состава шампуней должна перейти на новый научно-методический уровень.

Цель данной работы – описание контроля качества сухих экстрактов и разработка

простого алгоритма подбора компонентов шампуня лекарственного на основе действующих веществ *Ginkgo biloba L.* и *Rosa odorata (Andrews) Sweet*. Исследование экстрактов проведено согласно требованиям ГФ XIV, подбор компонентов осуществлялся по результатам квантово-химических расчетов и методов компьютерного прогнозирования. Определен оптимальный состав шампуня лекарственного, включающего сухие экстракты *Ginkgo biloba L.* и *Rosa odorata (Andrews) Sweet*.

**Ключевые слова:** шампуни лекарственные, *Ginkgo biloba L.* экстракт сухой и *Rosa odorata (Andrews) Sweet* шрота экстракт сухой, подбор вспомогательных веществ, полуэмпирический квантово-химический метод РМ7.

Современный рынок косметической продукции в основном представлен препаратами на основе синтетических компонентов, что в сочетании с вышеизложенными проблемами приводит к появлению аллергий, дерматитов, различных воспалительных процессов кожи лица и головы. Использование народной медицины в косметологии позволяет сократить перечень компонентов, получаемых синтетическим путем, и, следовательно, сделать косметические продукты более «дружелюбными» по отношению к человеку. Особенно это касается вводимых в состав препаратов вспомогательных веществ, задачами которых является улучшение потребительских свойств товаров и увеличение терапевтического действия активных компонентов.

Одни из самых востребованных товаров косметической продукции в аптеках – средства для ухода за кожей головы и волосами. Согласно исследованиям, проблемы кожи головы или волос имеются у 80% населения страны, среди которых наиболее часто встречаются: дерматит, алопеция, повреждение волосяных луковиц или структуры волос [2].

Данные нарушения могут являться причиной местных или системных нарушений в организме. Полифункциональные шампуни с биологически активными компонентами стали наиболее актуальными способами решения местных проблем волос и кожи головы.

Тенденция к разработке лекарственных средств, в состав которых входит лекарственное растительное сырье (ЛРС) или его производные, обусловлена преимуществами биологически активных компонентов ЛРС перед субстанциями химического происхождения – по меньшему количеству побочных эффектов и большей широте фармакотерапевтического действия за счет комплекса биологически активных веществ (БАВ) в составе ЛРС.

Экстракты из ЛРС нашли широкое применение в качестве БАВ в средствах для ухода за кожей головы и волосами. Одними из фармакологически активных компонентов лекарственных шампуней являются флавоноиды (антоцианы, фенольные кислоты, такие как хлорогеновая кислота, катехины и флавонолы), которые обладают противовоспалительными, антиоксидантными, антимикробными, регенерирующими, ранозаживляющими, подсушивающими, увлажняющими и успокаивающими свойствами [3–5].

Одним из наиболее интересных лекарственных растений, сырье которого может быть использовано для разработки шампуней лекарственных, является *Ginkgo biloba L.* Исследования *in vitro* показали, что экстракт листьев гинкго билоба обеспечивает улучшение микроциркуляции на уровне волосяного фолликула, замедляет процессы старения на клеточном уровне и восстанавливает углеводный обмен на уровне волосяного фолликула [6–8]. По результатам доклинических исследований доказаны антиоксидантные, противовоспалительные и ранозаживляющие свойства наружных лекарственных форм, содержащих гинкго билоба листьев экстракт и их производные [9–11].

Перспективным компонентом шампуня лекарственного является ЛРС растений рода Шиповник (*Rosa*), а также их производные. Широко известно применение эфирных масел данного рода, которое обладает антисептическим, противовирусным, противогрибковым, противовоспалительным и вяжущим свойствами [12]; лепестки цветов растений рода Шиповник обладают противомикробным, противовоспалительным и антиоксидантным действиями [13].

Роза чайная используется в народной медицине несколько веков, причем именно в косметологии применение цветов розы наиболее обширно. Поэтому использование суммы веществ сухого экстракта розы чайной в качестве вспомогательного вещества, усиливающего терапевтический эффект гинкго билоба (сухой экстракт), представляется актуальным.

**Целью** работы является компьютерное моделирование с элементами искусственного интеллекта состава комбинированных шампуней лекарственных с сухими экстрактами гинкго билоба и шрота розы чайной.

## МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Объектами исследования являлись сухой экстракт *Ginkgo biloba* L. и шрот сухого экстракта *Rosa odorata* (Andrews) Sweet.

Оценку качества сухих экстрактов проводили согласно требованиям ГФ XIV по следующим показателям: описание, потеря в массе при высушивании, насыпной объем, тяжелые металлы, микробиологическая чистота, количественное определение действующих веществ (сумма флавоноидов в пересчете на рутин).

В качестве вспомогательных веществ использовали: магний сернокислый 7-водный (ХЧ) (АО «Химический завод им Л.Я. Карпова», Россия); натрия лаурилсульфат (ГОСТ 12.1.007, ООО ГК «РусХим», Россия), поливиниловый спирт (ТУ 6-09-4004-67, ООО ГК

«РусХим», Россия), масло репейное (АО «Комбинат «Крымская роза», г. Симферополь), эфирное масло розы (АО «Комбинат «Крымская роза», г. Симферополь), олеиновая кислота (ТУ 9145-172-473129794, ЗАО «СП Химпром», Россия).

Для оценки взаимодействия активных и вспомогательных веществ проведен квантово-химический расчет и дано описание молекул компонентов с использованием полуэмпирического метода молекулярных орбиталей PM7 [14], входящего в состав свободно распространяемого для академических целей пакета программ MOPAC V.22.0.4 [15]. Исходная геометрия генерировалась с использованием программы молекулярного моделирования HyperChem 8 [16]. Задания для расчета вводились в формате ZMT.

Далее был сформирован базовый перечень веществ, входящих в состав шампуня лекарственного [17], из которого составлялось задание для расчета физико-химических дескрипторов.

В случае лекарственной формы «Шампуни лекарственные», в которой все компоненты находятся в жидкой дисперсионной среде, наиболее важными являются дескрипторы, оценивающие гидрофильность и реакционную способность, как факторы, обеспечивающие агрегативную устойчивость и стабильность шампуня при длительном хранении [18]. Чем ближе вспомогательные вещества по перечисленным свойствам друг к другу и действующим веществам, тем более стабильной и устойчивой будет лекарственная форма. Поскольку основными компонентами ЛФ являются полимерные структуры различной степени сложности, в схему отбора вспомогательных веществ был введен дескриптор – удельная теплота гидратации  $\Delta H_{\text{hydr}}/\text{Å}^2$ , рассчитываемая как отношение теплоты гидратации к площади ван-дер-ваальсовой модели молекулы. Оценка взаимной реакционной способности компонентов проводилась путем расчета

глобальной электрофильности  $\omega_g$  ( $\omega_g = \mu^2/2\eta$ ). Это аналог индекса электрофильности функциональных групп, но применимый к любой молекуле «целиком» [19].

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Оценку качества сухих экстрактов проводили в соответствии с требованиями Государственной фармакопеи ОФС ОФС.1.4.1.0021 «Экстракты» [20]. Сухие экстракты по показателям, регламентируемым ОФС, отвечают требованиям (табл. 1, 2).

Результатом квантово-химического расчета явилось полное описание геометрического

и электронного строения молекул действующего и вспомогательных веществ в двух приближениях: с учетом гидратации (задана диэлектрическая проницаемость среды  $\epsilon_{PS}=78,4$ , расчет гидратации с использованием математической модели COSMO) [21] и без учета гидратации (в модельном вакууме).

Квантово-химический расчет электронного сродства мажорных компонентов сухого экстракта гинкго и розы проводился по флавоноидам: рутин, кверцетин и дитерпеноида гинкголида «В» в условиях модельного вакуума и модельной гидратации. На рис. 1 приведены трехмерные модели гинкголида «В» (без атомов водорода), рутина и кверцетина.

Таблица 1

### ПОКАЗАТЕЛИ КАЧЕСТВА СУХОГО ЭКСТРАКТА ГИНКГО БИЛОБА ЛИСТЬЕВ

Наименование показателя	Метод определения	Норма	Показатели качества полученного экстракта
Описание	Визуально	–	Коричневый порошок со специфическим запахом и горьковатым вкусом
Потеря в массе при высушивании, %	ГФХV, ОФС.1.2.1.0010	Не более 5,00%	4,25
Фракционный состав, %	Диаметр отверстий сита (d), мм		Содержание частиц данной фракции, %
	$d \geq 2$		0,00
	$1 \leq d \leq 2$		3,17
	$0,25 \leq d \leq 1$		75,87
	$d \leq 0,25$		20,96
Сыпучесть, г/с	ГФ XV, ОФС.1.4.2.0016	–	Не менее 1
Насыпной объем, г/см <sup>3</sup>	ГФ XV, ОФС.1.4.2.0024	–	Не более 0,75
Тяжелые металлы, %	ГФ XV, ОФС.1.2.2.2.0012	Не более 0,01%	Соответствуют

Окончание таблицы 1

Наименование показателя	Метод определения	Норма	Показатели качества полученного экстракта
Подлинность	Качественные реакции (цианидная проба)  ТСХ ГФ XV, ОФС.1.2.1.2.0003  Спектрофотометрия	Розовое окрашивание  На хроматограмме в ультрафиолетовом свете обнаруживается пятно с желто-оранжевой флуоресценцией, а также зоной адсорбции, соответствующей рутину  Дифференциальный спектр поглощения раствора сухого экстракта имеет максимум поглощения при длине волны 410±2 нм	Соответствуют
Количественное определение флавоноидов, в пересчете на рутин, мг	Спектрофотометрия		Не менее 20
Микробиологическая чистота	ГФ XV, ОФС.1.2.4.0002.18	Категория 2	Соответствует
Хранение	В защищенном от света месте при температуре от 15°C до 25°C		Соответствует

Таблица 2

### ПОКАЗАТЕЛИ КАЧЕСТВА СУХОГО ЭКСТРАКТА ШРОТА ЧАЙНОЙ РОЗЫ

Наименование показателя	Метод определения	Норма	Показатели качества полученного экстракта
Описание	Визуально	–	Светло коричневый порошок со слабым запахом розового масла и слабо горьким вкусом
Потеря в массе при высушивании, %	ГФ XV, ОФС.1.2.1.0010	Не более 5,00%	3,15

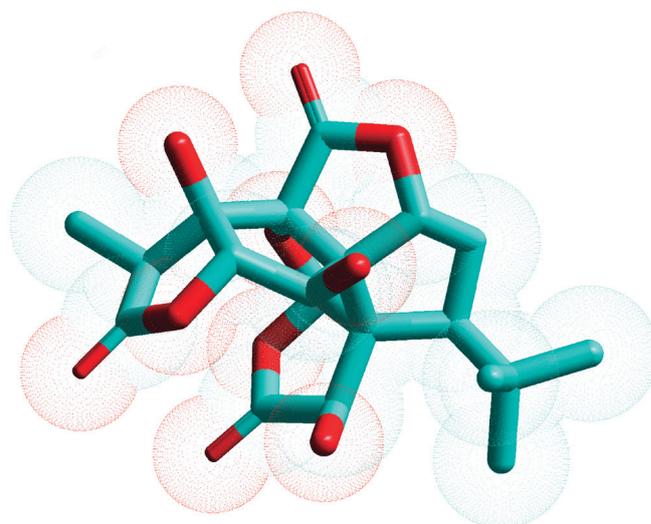
Наименование показателя	Метод оопределения	Норма	Показатели качества полученного экстракта
Фракционный состав, %	Диаметр отверстий сита (d), мм		Содержание частиц данной фракции, %
	$d \geq 2$		0,00
	$1 \leq d \leq 2$		2,15
	$0,25 \leq d \leq 1$		78,86
	$d \leq 0,25$		20,06
Сыпучесть, г/с	ГФ XV, ОФС.1.4.2.0016	–	не менее 1
Насыпной объем, г/см <sup>3</sup>	ГФ XV, ОФС.1.4.2.0024	–	не более 0,70
Тяжелые металлы, %	ГФ XV, ОФС.1.2.2.2.0012	Не более 0,01	Соответствуют
Подлинность	Качественные реакции (цианидная проба)	Розовое окрашивание	Соответствуют
	ТСХ ГФ XV, ОФС.1.2.1.2.0003	На хроматограмме в ультрафиолетовом свете обнаруживается пятно с желто-оранжевой флюоресценцией, а также зоной адсорбции, соответствующей рутину	
	Спектрофотометрия	Дифференциальный спектр поглощения раствора сухого экстракта имеет максимум поглощения при длине волны $410 \pm 2$ нм	
Количественное определение флавоноидов, в пересчете на рутин, мг	Спектрофотометрия		Не менее 20%
Микробиологическая чистота	ГФ XV, ОФС.1.2.4.0002.18	Категория 2	Соответствует
Хранение	В защищенном от света месте при температуре от 15°C до 25°C		Соответствует

Оценка дескрипторов, описывающих гидрофильность и реакционную способность молекул, является ключевой для описания их поведения в сложных гетерогенных средах, в том числе на границе раздела «воздух – эпидермис – дерма». Следует отметить, что классические методы сыграли большую роль при разработке автоматизированных систем оценки лиофильности как источник параметризации схем теоретического расчета, с другой стороны, точная оценка гидрофильности большинства веществ полимерной природы этим способом невозможна.

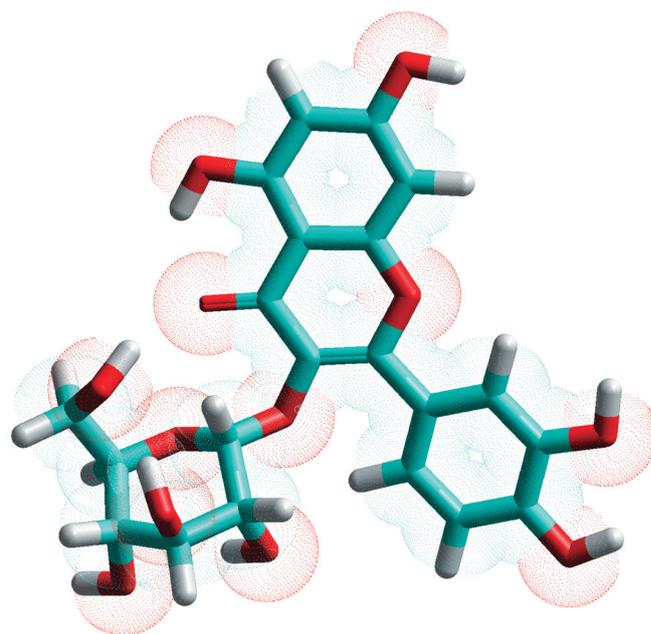
Вместе с тем разрабатываемая лекарственная форма в основном содержит в своем составе полимерные структуры различной степени сложности. Для отбора вспомогательных веществ введен дескриптор – удельная теплота гидратации  $\Delta H_{\text{hydr}}/\text{\AA}^2$ . Оценка взаимной реакционной способности компонентов проводится путем расчета глобальной электрофильности  $\omega_g$  ( $\omega_g = \mu/2\eta$ ). Этот дескриптор также инвариантен по отношению к размеру молекул, поэтому вещества полимерной природы могут описываться им после расчета относительно коротких сегментов, состоящих из 6–8 мономеров. Пример результатов расчета дескрипторов вспомогательных и действующих веществ представлен в табл. 3 и 4.

Проведенная методом k-средних [22] группировка по каждому из дескрипторов позволила отобрать вспомогательные вещества, дескрипторы которых оказались включенными в один кластер с дескрипторами действующих веществ сухих экстрактов *Ginkgo biloba* L. и *Rosa odorata* (Andrews) Sweet (выделены жирным шрифтом). В результате компьютерного моделирования предложены составы шампуней, представленные в табл. 5.

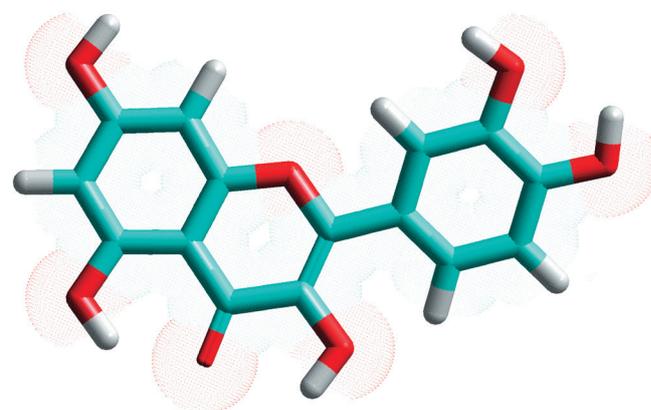
Теоретические расчеты дескрипторов, обеспечивающих показатели качества шампуней лекарственных, позволили разработать оптимальный состав лекарственной формы и продемонстрировали возможность



Трехмерная модель гинкголида В



Трехмерная модель рутина



Трехмерная модель кверцетина

**РИС. 1.** Модель молекул гинкголида «В», рутина и кверцетина

### МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ДЕСКРИПТОРЫ ВСПОМОГАТЕЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ ШАМПУНЯ ЛЕКАРСТВЕННОГО

Название соединения	$\Delta H_{\text{hydr}}/\text{Å}^2$	$\omega_{\text{gr}}$ эВ
<b>Олеиновая кислота</b>	<b>-0,028</b>	<b>1,304</b>
<b>Олеиновый спирт</b>	<b>-0,019</b>	<b>1,687</b>
Пальмитиновая кислота	-0,028	1,447
Пирролидон	-0,033	1,318
<b>Поливиниловый спирт</b>	<b>-0,022</b>	<b>1,647</b>
<b>Поливинилпирролидон</b>	<b>-0,063</b>	<b>1,291</b>
Полиизобутилен	-0,012	1,731
Поликарбонат	-0,031	1,122
<b>Полиметилакрилат</b>	<b>-0,059</b>	<b>1,451</b>
<b>Полиметилметакрилат</b>	<b>-0,052</b>	<b>1,434</b>
Полисилоксан	-0,010	1,305
Полиэтиленгликоль	-0,042	1,484
Полиэтиленоксид	-0,044	1,406
<b>Пропиленгликоль</b>	<b>-0,076</b>	<b>1,659</b>
Силиконовое масло	-0,026	1,301

Таблица 3

использования метода компьютерного моделирования при создании лекарственных препаратов с жидкой дисперсионной средой.

### ВЫВОДЫ

На основании изучения влияния БАВ гинкго и розы и вспомогательных веществ методом квантово-химического анализа с использованием таких дескрипторов, как гидрофильность и реакционная способность, удельная теплота гидратации и глобальная электрофильность, установлена экономическая целесообразность данного метода разработки жидких лекарственных форм. Совершенствование алгоритма анализа, определение надежных и однозначных дескрипторов, создание компьютерных программ и приложений, удобных для пользователя, открывает возможности для внедрения этого метода в производство.

Надежная оценка взаимного влияния компонентов лекарственной формы с использованием результатов квантово-химического расчета позволяет реализовать эффективный выбор основных и вспомогательных веществ.

### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Государственная фармакопея XV издания. ОФС.1.4.1.0041. Шампунь лекарственные – [Электронный ресурс]. – Электронные данные. – Режим доступа: <https://pharmacopoeia.regmed.ru/pharmacopoeia/izdanie-15/>. (Дата обращения 15.01.2024).
2. Евсеева С.Б. Фитокомпоненты в решении проблем волос и кожи головы / С.Б. Евсеева, Т.А. Олейникова // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – №2 – 2. – С. 469.
3. Хасанов А.Р. Перспективы использования экстрактов из растительного сырья

Таблица 4

### РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА МОЛЕКУЛ ДЕЙСТВУЮЩИХ ВЕЩЕСТВ

Название соединения	$\Delta H_{\text{hydr}}/\text{Å}^2$	$\omega_{\text{gr}}$ эВ
Гинголид В	<b>-0,065</b>	<b>1,512</b>
Кверцетин	<b>-0,061</b>	0,546
Рутин	<b>-0,069</b>	0,549

Таблица 5

### СОСТАВЫ ОБРАЗЦОВ ШАМПУНЯ С ГИНКГО БИЛОБА ЭКСТРАКТА СУХОГО И РОЗЫ ЧАЙНОЙ ШРОТА ЭКСТРАКТА СУХОГО

Состав образцов шампуня, г	Наименование состава		
	1	2	3
Гинкго билоба экстракт сухой, патент №2021102431/04 (005079)	2,0	2,0	2,0
Розы чайной экстракта сухого шрот, г АО «Комбинат «Крымская роза», г. Симферополь	2,0	2,0	2,0
Магний серноокислый 7-водный (ХЧ), АО «Химический завод им. Л.Я. Карпова», Россия	5,0	5,0	5,0
Натрия лаурилсульфат, ГОСТ 12.1.007, ООО ГК «РусХим», Россия	2,0	2,0	–
Поливиниловый спирт, ТУ 6-09-4004-67, ООО ГК «РусХим», Россия	1,0	–	1,0
Масло репейное, (АО «Комбинат «Крымская роза», г. Симферополь	2,0	2,0	2,0
Олеиновая кислота ТУ 9145-172-473129794, ЗАО «СП Химпром» Россия	–	1,0	2,0
Эфирное масло розы, (АО «Комбинат «Крымская роза», г. Симферополь	1,0	1,0	1,0
Вес образца, г	15,0	15,0	15,0

- с повышенным содержанием флавоноидов в полифункциональных шампунях / А.Р. Хасанов // Сырье и упаковка: для парфюмерии, косметики и бытовой химии. – 2016 г. [Электронный ресурс]. – Электронные данные. – Режим доступа: <https://cosmetic-industry.com/perspektivnyy-ispolzovaniya-ekstraktov-iz-rastitelnogo-syrya-s-povyshennym-soderzhaniem-flavonoidov-v-polifunktionalnykh-shampunyah.html>. (Дата обращения 15.01.2024).
- Алешникова К.Ю. Патентные исследования лекарственных средств ранозаживляющего, антимикробного и регенерирующего действия / К.Ю. Алешникова, М.А. Джавахян, Е.И. Грибкова // Фармация. – 2019. – Т. 68, №6. – С. 11–15.
  - Разработка и валидация методики количественного определения суммы флавоноидов в жидком и сухом экстрактах растительной композиции / М.А. Джавахян, М.Г. Токарева, Н.Б. Фадеев [и др.] // Вопросы обеспечения качества лекарственных средств. – 2021. – № 2(32). – С. 12–22.
  - Васильев-Ступальский Е.А. Комплексная коррекция андрогенетической алопеции / Е.А. Васильев-Ступальский // Фарматека. – 2017. – №4. – С. 36–43.
  - Снарская Е.С. Комплексный подход к коррекции нерубцовой алопеции различного генеза / Е.С. Снарская // Эффективная фармакотерапия. – 2017. – №40. – С. 12–18.
  - Болотная Л.А. Лечение андрогенетической алопеции с позиций доказательной медицины / Л.А. Болотная // Дерматология та венерология. – 2012. – №4(58). – С. 9–16.
  - Ажикова А.К., Цибизова А.А. Изучение регенерирующего действия наружного средства на основе экстракта листьев Гинкго двулопастного (*Ginkgo biloba* L.) в условиях термической травмы кожи // Прикаспийский вестник медицины и фармации. – 2020. – Т. 1. – №2. – С. 20–26.

10. Онбыш Т.Е., Макарова Л.М., Погорелый В.Е. Механизмы реализации фармакологической активности экстракта гинкго билоба // *Современные наукоемкие технологии*. – 2005. – №5. – С. 22–25.
11. Цибизова А.А. и др. Разработка состава средства для наружного применения на основе фитопелоидной композиции // *Астраханский медицинский журнал*. – 2018. – Т. 13. – №1. – С. 58–65.
12. Пономарева Е.И., Молохова Е.И., Хохлов А.К. Применение эфирных масел в фармацевции // *Современные проблемы в науке и образовании*. – 2015. – №4. – [Электронный ресурс]. – Электронные данные. – Режим доступа: <https://science-education.ru/ru/article/view?id=21156>. (Дата обращения: 15.01.2024).
13. Продукты растительного происхождения, используемые в косметических средствах (критический обзор) / С.А. Гвинджилия, Т.Г. Цинцадзе, М.А. Габеляя, П.А. Явич // *Современные научные исследования и инновации*. – 2019. – №5(97). – С. 65.
14. Stewart J.J. P. Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters / J.J. P. Stewart // *Journal of molecular modeling*. – 2013. – V. 19. – P. 1–32.
15. Open-source LGPL lic. – [Электронный ресурс]. – Электронные данные. – Режим доступа: <http://opentorac.net/>. (Дата обращения 15.01.2024).
16. HyperCube (C), академ. лиценз. №НС80SA-4-1BBF6.
17. Государственная фармакопея XV издания. ОФС.1.1.0041. Вспомогательные вещества – [Электронный ресурс]. – Электронные данные. – Режим доступа: <https://pharmacopoeia.regmed.ru/pharmacopoeia/izdanie-15/1/1-1/vspomogatelnye-veshchestva>. (Дата обращения 15.01.2024).
18. Государственная фармакопея XV издания. ОФС.1.1.0009. Стабильность и сроки годности лекарственных средств – [Электронный ресурс]. – Электронные данные. – Режим доступа: <https://pharmacopoeia.regmed.ru/pharmacopoeia/izdanie-15/1/1-1/stabilnost-i-sroki-godnosti-lekarstvennykh-sredstv>. (Дата обращения 15.01.2024).
19. Parr R.G., Szentpály L., Liu S. Electrophilicity index // *Journal of the American Chemical Society*. – 1999. – V. 121. – №9. – P. 1922–1924.
20. Государственная фармакопея XV издания. ОФС.1.4.1.0021 «Экстракты» – [Электронный ресурс]. – Электронные данные. – Режим доступа: <https://pharmacopoeia.regmed.ru/pharmacopoeia/izdanie-15/1/1-4/1-4-1-lekarstvennye-formy/ekstrakty/>. (Дата обращения 15.01.2024).
21. Klamt A., Eckert F., Hornig M. COSMO-RS: A novel view to physiological solvation and partition questions // *Journal of Computer-Aided Molecular Design*. – 2001. – V. 15. – P. 355–365.
22. Прудковский Н.С. Кластеризация данных методом к-средних / Н.С. Прудковский // *Безопасные информационные технологии: Сборник трудов Восьмой всероссийской научно-технической конференции, Москва, 6–7 декабря 2017 года / НУК «Информатика и системы управления»*. Под. ред. М.А. Басараба. – Москва: Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет), 2017. – С. 347–350.

## COMPUTER FORECASTING AND QUALITY CONTROL OF THE COMPOSITION OF MEDICINAL SHAMPOO WITH *GINKGO BILOBA* L. AND *ROSA ODORATA* (ANDREWS) SWEET EXTRACTS BASED ON QUANTUM CHEMICAL CALCULATION AND ELEMENTS OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE

E.V. Kovtun<sup>1</sup>, L.V. Pogrebnyak<sup>1</sup>, A.V. Pogrebnyak<sup>1</sup>, A.A. Prokopov<sup>2</sup>, A.P. Pleten<sup>2</sup>, T.Yu. Tatarenko-Kozmina<sup>2</sup>, V.I. Zvereva<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Pyatigorsk Medical and Pharmaceutical Institute, Pyatigorsk, Russia

<sup>2</sup> Moscow State University of Medicine and Dentistry, Moscow, Russia

*At the beginning of autumn 2023, a significant event took place in the field of quality assurance and standardization of medicines: from 09/01/2023, the XV edition of the State Pharmacopoeia of the Russian Federation was introduced by Order of the Ministry of Health of Russia dated 07/20/2023 №377, article GPM.1.4.1.0041 "Medical shampoos" was introduced, according to which "Medicinal shampoos must comply with the general requirements of the General Pharmacopoeia Monograph "Dosage Forms". Thus, a new full-fledged participant has appeared in the extensive group of liquid dosage forms (LDF). Changes in the quality regulations for medicinal shampoos suggest that innovative development methods previously used to obtain other liquid substances can be successfully applied in the case of designing the composition of medicinal shampoos. Accordingly, the situation with the development of shampoo composition should move to a new scientific and methodological level.*

**Keywords:** medicinal shampoos, Ginkgo biloba L. dry extract and Rosa odorata (Andrews) Sweet meal dry extract, selection of excipients, semi-empirical quantum chemical method PM7