DOI https://doi.org/10.11603/mcch.2410-681X.2026.i2.16362
УДК 615.31:001.891:004.8:577.27

М. Я. Головенко, ORCID: 0000-0003-1485-128X

ФІЗИКО-ХІМІЧНИЙ ІНСТИТУТ ІМЕНІ О.В. БОГАТСЬКОГО НАН УКРАЇНИ

МЕТОДИ *IN CEREBRO* – НОВА ПАРАДИГМА ДОСЛІДЖЕНЬ У МЕДИЧНІЙ ХІМІЇ ТА ДИЗАЙНІ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ

Вступ. *Сучасна медична хімія базується переважно на використанні методів in silico, in vitro та in vivo, які визначають основні етапи пошуку й дослідження нових лікарських засобів. Проте класична схема не враховує етап формування наукової ідеї, постановки проблеми, концептуалізації терапевтичної мішені та прогнозування властивостей майбутнього препарату. У зв'язку з цим концепція in cerebro пропонується як новий когнітивний етап медичної хімії, що передує комп'ютерним, лабораторним та біологічним методам верифікації.*

Мета роботи. *Метою роботи є теоретико-методологічне обґрунтування концепції in cerebro як нового етапу раціонального дизайну лікарських засобів, визначення його місця у структурі сучасних фармацевтичних досліджень, а також аналіз ролі когнітивного мислення та штучного інтелекту (ШІ) у формуванні інноваційних терапевтичних концепцій.*

Методи дослідження. *У роботі використано системний, епістемологічний, міждисциплінарний та прогностичний підходи. Для оцінювання ролі ШІ використано елементи аналізу сучасних цифрових технологій у медичній хімії.*

Результати та обговорення. *Обґрунтовано доцільність виокремлення етапу in cerebro як первинного когнітивного рівня створення лікарських засобів. Встановлено, що in cerebro не є альтернативою традиційним методам медичної хімії, а виконує функцію їх методологічної основи. Окрему увагу приділено ролі ШІ як засобу когнітивного підсилення дослідника.*

Висновки. *Концепція in cerebro запропонована як нова методологічна парадигма медичної хімії та раціонального дизайну лікарських засобів, що описує когнітивний етап формування наукового задуму перед його комп'ютерною та експериментальною верифікацією. Показано, що використання методу in cerebro дозволяє переосмислити роль дослідника як центрального носія концептуального мислення та інтегратора міждисциплінарного знання. Встановлено, що майбутній розвиток медичної хімії значною мірою залежатиме від поєднання людського когнітивного потенціалу із можливостями ШІ у межах нової моделі гібридного наукового мислення.*

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ***in cerebro*****; медична хімія; дизайн лікарських засобів; когнітивне моделювання; штучний інтелект;** ***in silico*****; методологія науки;**

ВСТУП. У сучасній медичній хімії та фармацевтичній науці стало майже аксіомою описувати властивості лікарського засобу через послідовність методологічних підходів *in silico*, *in vitro* та *in vivo*. Ця тріада давно набула статусу універсальної схеми наукового пошуку: комп'ютерне моделювання, лабораторний експеримент, дослідження на живому організмі [1-3]. Саме через неї сьогодні пояснюють логіку переходу від молекулярної ідеї до клінічного застосування препарату.

Проте така схема, попри її практичну цінність, залишає поза увагою найперший і, можливо, найважливіший етап будь-якого наукового дослідження – момент виникнення самої ідеї. Адже жоден алгоритм, жодна експериментальна система і жодна біологічна модель не запускаються самі по собі. Перед будь-яким дослідженням *in silico* завжди існує те, що ще не піддається комп'ютерному моделюванню; перед будь-яким *in vitro* – те, що ще не стало предметом лабораторного аналізу; перед будь-яким *in vivo* – те, що ще не набуло форми експериментальної гіпотези. Цей первинний простір наукового пошуку формується у мисленні дослідника [4]. Саме тому постає необхідність виокремити особливий методологічний етап стратегічного та раціонального проєктування лікарських засобів, який можна позначити терміном *in cerebro* («у свідомості», «у

© М. Я. Головенко, 2026

мисленні», «у когнітивному просторі науковця»). Йдеться не про метафору і не про поетичний образ науки, а про спробу концептуально окреслити реальний процес народження наукового знання ще до його експериментальної верифікації.

МЕТА ДОСЛІДЖЕННЯ – теоретико-методологічне обґрунтування концепції *in cerebro* як нового етапу раціонального дизайну лікарських засобів, визначення його місця у структурі сучасних фармацевтичних досліджень, а також аналіз ролі когнітивного мислення та ШІ у формуванні інноваційних терапевтичних концепцій.

МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ. У роботі використано системний, епістемологічний, міждисциплінарний та прогностичний підходи. Застосовано методи концептуального аналізу сучасних моделей створення препаратів, методологічного узагальнення, когнітивного моделювання та порівняльного аналізу етапів *in silico*, *in vitro* та *in vivo* [5]. Для оцінювання ролі ШІ використано елементи аналізу сучасних технологій у медичній хімії та комп'ютерній фармакології [6].

ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА. Наука традиційно прагнула об'єктивності, тому схильна була розглядати дослідника радше як спостерігача, ніж як активного творця концептуальних моделей. Однак, історія великих відкриттів переконує у тому, що будь-який прорив у науці починався не з експерименту, а з інтелектуального акту, з припущення, сумніву, аналогії, інтуїції або нового способу побачити проблему [7]. Відкриття антибіотиків, рецепторної теорії, молекулярних механізмів захворювань чи таргетної терапії виникали спершу як когнітивні конструкції, що лише згодом отримували експериментальне підтвердження.

У цьому сенсі *in cerebro* є не просто початковою фазою дослідження, а його справжнім джерелом. Саме тут відбувається постановка проблеми, визначення медичної потреби, осмислення патогенезу, прогнозування терапевтичної мішені та формування уявлення про майбутній лікарський засіб. На цьому етапі дослідник не працює безпосередньо з речовиною, а він окреслює можливість її існування (Рис.).

Особливість *in cerebro* полягає в тому, що його предметом є ще не готове, а тільки потенційне знання бо формується не результат, а напрямок пошуку, який має виразно прогностичний характер. Науковець змушений передбачати ефективність майбутньої молекули, її токсичність, клінічну доцільність, економічну доступність та місце серед уже існуючих терапевтичних стратегій. Фактично *in cerebro* поєднує кілька рівнів інтелектуальної діяльності. Це і аналітичне мислення, необхідне для критичного оцінювання наявних знань; і творче мислення, що дозволяє виходити за межі усталених моделей; і системне мислення, яке інтегрує дані хімії, біології, фармакології, клінічної медицини та навіть соціально-економічних чинників.

Рис. Дослідження *in cerebro* серед інших методів медичної хімії

Саме тут виникає міждисциплінарна цілісність сучасної медичної хімії. У багатьох випадках саме якість цього етапу визначає, чи стане подальше *in silico* або *in vitro* дослідження перспективним, чи перетвориться лише на накопичення даних без стратегічного сенсу. Тому введення поняття *in cerebro* є не просто термінологічним доповненням до класичної тріади *in silico – in vitro – in vivo*, а йдеться про ширше методологічне переосмислення процесу створення лікарських засобів.

Якщо традиційні етапи описують середовище перевірки гіпотези, то *in cerebro* описує середовище її народження. У цьому контексті наукове дослідження постає не лише як технічний процес отримання даних, а як когнітивний процес створення смислу. І саме тому майбутнє раціонального дизайну лікарських засобів, ймовірно, дедалі більше залежатиме не тільки від потужності лабораторій чи обчислювальних систем, а й від глибини наукового мислення, здатного побачити нову терапевтичну можливість ще до того, як вона стане об'єктом експерименту.

Для розкриття концепції методів *in cerebro* як нової парадигми досліджень у медичній хімії застосовано комплекс взаємодоповнювальних наукових підходів, спрямованих не лише на аналіз існуючих моделей створення лікарських засобів, але й на осмислення когнітивних механізмів виникнення наукової ідеї. На відміну від традиційних експериментальних методологій, які переважно фокусуються на етапах перевірки гіпотез, концепція *in cerebro* акцентує увагу на передекспериментальному просторі наукового пошуку – етапі формування задуму, прогнозування та концептуального моделювання майбутнього терапевтичного рішення.

Наукові методи *in cerebro*.

У біомедичній науці давно склалася зрозуміла система дослідницьких підходів *in vitro*, *in vivo* та *in silico*, кожен з яких має власний набір методів, інструментів і критеріїв перевірки. Якщо ж прийняти існування ще одного рівня наукового процесу, *in cerebro*, то неминуче виникає питання, чи має він власні методи, чи це лише метафора для «роздумів дослідника»? Відповідь полягає в тому, що методи *in cerebro* не лише існують, а й супроводжують науку від самого її виникнення, але вони рідко усвідомлювалися як окрема методологічна система. Методи *in cerebro* формують, перебудовують, критикують та відбирають наукові гіпотези до початку їх експериментальної перевірки тобто працюють з логікою майбутнього знання. Якщо *in vitro* і *in vivo* відповідають на питання «що відбувається?», а *in silico* – «чи можна це змоделювати?», то *in cerebro* ставить фундаментальніше питання: «Що взагалі варто досліджувати?» і саме тут формується науковий задум та концептуальне моделювання. Одним із головних методів *in cerebro* є побудова концептуальної моделі явища, де йдеться не про математичні рівняння, а про створення причинної структури досліджуваного процесу. Дослідник намагається зрозуміти, що є причиною, а що наслідком, які змінні справді мають значення, де може бути ключовий механізм патології, які зв'язки між явищами є суттєвими, а які випадковими. Саме тут народжується логіка майбутнього дослідження.

Мисленнєвий експеримент є одним із найстаріших інструментів науки бо дозволяє перевіряти внутрішню логіку ідеї ще до фізичної перевірки. Саме так працювали багато фундаментальних концепцій у фізиці, математиці та біології [8].

Ще одним методом *in cerebro* є здатність уявляти альтернативні пояснення. Сильна гіпотеза повинна не лише пояснювати факти, а й витримувати питання, чи існує інше пояснення результату, чи не є спостережуваний ефект другорядним явищем? Цей метод особливо важливий для боротьби з упередженням підтвердження, однією з найнебезпечніших когнітивних пасток науки. Багато відкриттів виникає на межі дисциплін, тому інтеграція різнорідних знань також належить до методів *in cerebro*.

Значна частина наукових ненвдач починаються саме з неправильного вибору проблеми, тому належне *in cerebro* передбачає не лише генерацію ідей, але і їх систематичне удосконалення. Тому до методів *in cerebro* належать критично-опонентний аналіз, стратегії першочергового спростування гіпотез, організована перевірка слабких місць гіпотези. Нерідко саме цей етап визначає, чи виживе ідея після зустрічі з реальністю.

Штучний інтелект як когнітивний партнер у розвитку in cerebro.

Якщо традиційно ШІ розглядався переважно як інструмент обчислення, аналізу великих масивів даних або оптимізації пошуку молекул, то в межах нової методологічної парадигми його функція стає значно глибшою [9, 10]. Він здатний прискорювати інтеграцію знань, знаходити неочевидні зв'язки, допомагати в генерації гіпотез та

виконувати роль інтелектуального опонента. Це дозволило сформулювати положення про виникнення нового типу гібридного пізнання, у межах якого людська інтуїція та алгоритмічний аналіз формують спільний простір генерації гіпотез [11]. У класичній моделі наукового пошуку цей етап майже повністю належав людині, оскільки лише дослідник формував ідею, інтерпретував факти, шукав аналогії та передбачав нові напрями терапії. Однак сучасні системи ШІ дедалі активніше входять саме у простір концептуального конструювання знання.

Важливо, що ШІ не мислить у людському сенсі слова, оскільки не має інтуїції, клінічного досвіду чи внутрішнього переживання наукової проблеми. Проте він володіє здатністю одночасно охоплювати колосальні обсяги інформації та виявляти приховані закономірності, які залишаються поза межами людського сприйняття [12]. Саме тому у межах *in cerebro* ШІ стає не заміною науковця, а розширенням його когнітивних можливостей. Фактично формується новий тип наукового мислення – гібридне мислення, у якому людська інтуїція поєднується з алгоритмічною здатністю до багатовимірного аналізу [11]. Дослідник уже не лише створює гіпотезу самостійно, а веде своєрідний інтелектуальний діалог із системою, яка здатна пропонувати неочевидні зв'язки між біологічними мішенями, прогнозувати поведінку молекул, виявляти перспективні терапевтичні напрямки, інтегрувати дані геноміки, протеоміки, фармакології та клінічної практики, моделювати можливі наслідки втручання у патологічний процес.

У цьому сенсі ШІ стає учасником формування наукової гіпотези ще до початку експерименту. Якщо *in silico* описує використання комп'ютерних моделей для перевірки чи оптимізації вже сформованої концепції, то в межах *in cerebro* ШІ бере участь у виникненні самої концепції. Це означає, що сучасний ШІ поступово зміщує свою роль:від інструмента обчислення до інструмента когнітивного підсилення. Особливо важливим це стає у медичній хімії, де кількість потенційних молекулярних взаємодій практично нескінченна. Людське мислення, навіть найгеніальніше, фізично не здатне охопити весь простір можливих рішень. ШІ, навпаки, може швидко аналізувати мільйони структур і сценаріїв, але не здатний самостійно визначити, яка проблема є справді медично значущою. Саме тому між людиною та ШІ виникає принципова взаємодоповнюваність [11]. Людина визначає цінність терапевтичної ідеї; машина допомагає побачити приховані варіанти її втілення. І саме тут виникає одна з найглибших особливостей концепції *in cerebro*, яка вперше дозволяє розглядати ШІ не лише як технологію, а як елемент теорії пізнання сучасної науки. Проте така трансформація породжує і нові виклики бо чим більше дослідник покладається на ШІ, тим важливішим стає питання критичного мислення. Існує небезпека, що алгоритмічні рекомендації почнуть сприйматися як готове знання, хоча насправді вони є лише статистичною реконструкцією можливостей. Так ШІ може запропонувати перспективну молекулу, але він не здатний самостійно оцінити гуманістичний сенс майбутньої терапії, соціальні наслідки її застосування чи етичну цінність медичного рішення. Тому в межах *in cerebro* ШІ повинен залишатися не автономним автором наукової ідеї, а когнітивним партнером людини. Його справжня роль полягає не у витісненні дослідника, а у поглибленні самого процесу наукового мислення.

Науково-методологічна оцінка концепції *in cerebro*

Сучасний розвиток науки супроводжується не лише появою нових технологій дослідження, але й формуванням нових методологічних підходів до розуміння процесу отримання знання [13]. У цьому контексті концепція *in cerebro* пропонується як окремий когнітивний рівень наукової діяльності, що передує етапам комп'ютерної, лабораторної та біологічної верифікації. Її поява зумовлена необхідністю методологічного виокремлення процесів формування наукової ідеї, генерації гіпотез, концептуального моделювання та прогнозування перспективності дослідження.

Перевага терміна *in cerebro* над висловом «доекспериментальне вивчення» полягає насамперед у тому, що він позначає не часову стадію, а якісно окремий тип наукової діяльності. «Доекспериментальне вивчення» звучить як технічний або організаційний етап перед основним дослідженням і він описує лише послідовність дій, де щось відбувається до експерименту. Проте він не пояснює, що саме є предметом цього етапу, які процеси там відбуваються і чому вони мають власну методологічну цінність. Натомість *in cerebro* акцентує увагу на тому, що ще до появи експерименту існує окремий когнітивний простір науки, у якому формується наукова проблема, народжується гіпотеза, створюється причинна модель,

визначається терапевтична мішень та оцінюється перспективність майбутнього дослідження. Таким чином, *in cerebro* описує не просто «підготовку до експерименту», а саме когнітивну фазу створення наукового задуму.

Існує й інша важлива перевага. Вислів «доекспериментальне вивчення» методологічно дуже широкий і нечіткий. До нього можна віднести: огляд літератури, планування бюджету, адміністративну підготовку, підбір обладнання, попередні тести. Тобто цей термін не відокремлює власне процес наукового мислення від організаційної діяльності. *In cerebro*, навпаки, концентрується саме на концептуальному моделюванні, генерації гіпотез, мисленнєвих експериментах, опонентному мисленні та когнітивній інтеграції знань. Нарешті, важливо й те, що новий термін дозволяє методологічно підкреслити просту, але фундаментальну думку про те, що великі наукові відкриття і великі наукові помилки народжуються не під час експерименту, а на рівні мислення. Саме цей рівень і намагається назвати концепція *in cerebro*.

Попри значний методологічний потенціал, концепція *in cerebro* не позбавлена обмежень, а саме її когнітивна природа породжує низку ризиків, які потребують особливої уваги. Найперше обмеження полягає у високому рівні суб'єктивності. Людське мислення, навіть найбільш раціональне, завжди залежить від попереднього досвіду, наукових переконань, інтелектуальних упереджень та інтуїтивних схем сприйняття. Іноді саме ці фактори можуть сприяти народженню геніальної ідеї, але іноді і навпаки, обмежувати здатність побачити альтернативні напрямки пошуку.

Існує також небезпека надмірної теоретизації, оскільки захоплення концептуальними моделями може створити ілюзію достатнього розуміння біологічного процесу без його реальної експериментальної перевірки. У такому випадку *in cerebro* ризикує перетворитися на самодостатню інтелектуальну конструкцію, відірвану від емпіричної реальності.

Окремий ризик пов'язаний із використанням ШІ бо алгоритми здатні генерувати надзвичайно велику кількість можливих гіпотез, однак вони не розрізняють наукову значущість і статистичну ймовірність [14]. У результаті може виникати хибне відчуття об'єктивності алгоритмічних висновків. Якщо дослідник втрачає критичну дистанцію, ШІ починає не підсилювати мислення, а підміняти його.

Крім того, концепція *in cerebro* вимагає дуже високого рівня міждисциплінарної підготовки. Ефективне когнітивне моделювання можливе лише тоді, коли дослідник здатний інтегрувати знання з хімії, біології, фармакології, клінічної медицини, даних науки та філософії, без яких існує ризик спрощених або поверхневих концепцій.

І нарешті, найголовніше обмеження *in cerebro* полягає у тому, що жодна, навіть найгеніальніша ідея не може замінити експеримент. Біологічна реальність значно складніша за будь – яку модель, а тому остаточна істинність наукової концепції завжди перевіряється лише практикою. Саме тому *in cerebro* не слід розглядати як альтернативу *in vitro* чи *in vivo*. Його справжня роль полягає у тому, щоб зробити експеримент більш осмисленим, раціональним і цілеспрямованим.

Таким чином первинно концепція *in cerebro* може сприйматися як явище, тісно пов'язане з медичною хімією, дизайном лікарських засобів або біомедичними дослідженнями. Проте при глибшому розгляді стає очевидним, що *in cerebro* може розглядатися як універсальний когнітивний рівень будь-якої науки. Усі наукові галузі, незалежно від предмета дослідження, мають спільну особливість, оскільки перед появою методу, експерименту, формули або технології завжди виникає ідея. У природничих науках *in cerebro* проявляється через побудову причинних моделей, створення гіпотез і мисленнєві експерименти. У технічних дисциплінах через конструювання нових принципів і прогнозування функціональних систем. У гуманітарних науках через інтерпретацію смислів, реконструкцію історичних процесів і створення теоретичних рамок. У мистецтві та дизайні через формування образу, який ще не існує у фізичній реальності. Отже, *in cerebro* можна розглядати як універсальний рівень науки, де формується не результат, а напрям майбутнього пошуку.

ВИСНОВКИ. Концепція *in cerebro* запропонована як нова методологічна парадигма медичної хімії та раціонального дизайну лікарських засобів, що описує когнітивний етап формування наукового задуму перед його комп'ютерною та експериментальною верифікацією. Показано, що використання методу *in cerebro* дозволяє переосмислити роль дослідника як центрального носія концептуального мислення та інтегратора міждисциплінарного знання. Встановлено, що

майбутній розвиток медичної хімії значною мірою залежатиме від поєднання людського когнітивного потенціалу із можливостями ШІ у межах нової моделі гібридного наукового мислення.

Головне значення концепції *in cerebro* полягає в тому, що вона повертає увагу науки до її найменш формалізованого, але найважливішого етапу, моменту народження ідеї. Адже великі відкриття починаються не з обладнання, не з алгоритмів і навіть не з даних. Вони починаються з правильно поставленого питання.

ІНФОРМАЦІЯ ПРО ФІНАНСУВАННЯ: дослідження проведено за власний кошт, без зовнішнього фінансування.

ІНФОРМАЦІЯ ЩОДО КОНФЛІКТУ ІНТЕРЕСІВ: відсутній.

ВІДПОВІДНІСТЬ МАТЕРІАЛІВ СТАТТІ ЩОДО ПРОВЕДЕННЯ ОБСТЕЖЕНЬ/ДОСЛІДЖЕНЬ/ЛІКУВАННЯ НОРМАМ БІОЕТИКИ: автори рукопису засвідчують, що у роботі не використовувались персоніфіковані дані пацієнтів, результати первинних клінічних або доклінічних досліджень. У зв'язку з цим отримання схвалення комісії з питань біоетики не вимагалось. Дослідження виконане з дотриманням принципів належної наукової практики та відповідно до міжнародних етичних стандартів, зокрема рекомендацій Комітету з публікаційної етики «COPE» (Committee on Publication Ethics).

ІНФОРМАЦІЯ ПРО ДОСТУПНІСТЬ ПЕРВИННИХ ДАНИХ**:** первинні дані, що підтверджують результати цього дослідження доступні за обґрунтованим запитом до авторів, з урахуванням вимог конфіденційності та етичних норм.

ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОРИСТАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ: автор рукопису засвідчує використання інструментів генеративного штучного інтелекту у процесі підготовки цього рукопису. Відповідно до Таксономії делегування завдань генеративному штучному інтелекту «GAIDeT» (Generative Artificial Intelligence Delegation Taxonomy, 2025), за повного людського нагляду було делеговано завдання з генерації ілюстрації, виконаної за допомогою ChatGPT (GPT-5 mini, OpenAI, 2026). Усі результати, отримані за допомогою цих інструментів, були ретельно перевірені, відредаговані та затверджені автором, який несе повну відповідальність за зміст публікації. Інструменти генеративного штучного інтелекту не зазначаються як автори та не несуть відповідальності за кінцеві результати.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1.Patrick, G. L. An Introduction to Medicinal Chemistry (2023). 7th ed. Oxford: Oxford University Press. 925p. USBN 0198869436, 9780198869436.

2.Wermuth, C. G. (Ed.). The Practice of Medicinal Chemistry (2020). 5th ed. London: Academic Press. 982p. USBN 0080568777, 9780080568775

3.Cavasotto, C. N., Orry, A. J. W. (2007). Ligand docking and structure-based virtual screening in drug discovery. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 7(10), 1006–1014. DOI: 10.2174/156802607780906753

4.Lionta, E., Spyrou, G., Vassilatis, D. K., Cournia, Z. (2014). Structure-based virtual screening for drug discovery: principles, applications and recent advances. *Current Topics in Medicinal Chemistry,* 14(16), 1923–1938. DOI: 10.2174/15680266 14666140929124445

5.Kirchmair, J., Göller, A. H., Lang, D. et al. (2015). Predicting drug metabolism: experiment and/or computation? *Nature Reviews Drug Discovery*, 14, 387–404. DOI: 10.1038/nrd4581

6.Schneider, G. (2018). Automating drug discovery. *Nature Reviews Drug Discovery,* 17, 97–113.

7. Brown, N., Ertl, P., Lewis, R. et al. (2020). Artificial intelligence in chemistry and drug design. *Journal of Computer-Aided Molecular Design,* 34. 709–715. DOI: https://doi.org/10.1007/s10822-020-00317-x

8.Kuhn, T. S. The Structure of Scientific Revolutions (2012). 4th ed. Chicago: University of Chicago Press. 180 p.

9.Vamathevan, J., Clark, D., Czodrowski, P. et al. (2019). Applications of machine learning in drug discovery and development. *Nature Reviews Drug Discovery*, 18, 463–477. DOI: 10.1038/s41573-019-0024-5.

10.Paul, D., Sanap, G., Shenoy, S. et al. (2021). Artificial intelligence in drug discovery and development. *Drug Discovery Today.* 26(1). 80–93.

11. Golovenko, M.Ya. (2026). Cognitive-algorithmic system: promt as a mechanism for harmonizing human thinking and artificial intelligence systems. *NeuroNews,* 4. 27–35. [in Ukrainian].

12.Kandel, E. R., Koester, J. D., Mack, S. H. (2021). Principles of Neural Science. 6th ed. New York: McGraw-Hill. 1650p. ISBN: 978-1-25-964224-1.

13.Popper, K. (2002). The Logic of Scientific Discovery London: Routledge. 236p. DOI: https://doi.org/10.4324/9780203994627.

14.Dehaene, S. (2020). How We Learn: Why Brains Learn Better Than Any Machine… for Now. New York: Viking. 319p. ISBN 0525559884, 9780525559887.

Адреса для листування: *n.golovenko@gmail.com*

M. Ya. Golovenko

O. V. BOGATSKY INSTITUTE OF PHYSICO-CHEMISTRY, NAS OF UKRAINE

IN CEREBRO METHODS: A NEW RESEARCH PARADIGM IN MEDICINAL CHEMISTRY AND DRUG DESIGN

Summary

Introduction. *Modern medicinal chemistry is primarily based on the application of in silico, in vitro, and in vivo methods, which define the main stages of the discovery and investigation of new drug candidates. However, the classical framework does not account for the stage of scientific idea formation, problem definition, conceptualization of therapeutic targets, and prediction of the properties of future drugs. In this context, the concept of in cerebro is proposed as a new cognitive stage of medicinal chemistry that precedes computational, laboratory, and biological methods of verification.*

Aim of the Study. *The aim of this work is to provide a theoretical and methodological substantiation of the in cerebro concept as a new stage in rational drug design, to determine its place within the structure of modern pharmaceutical research, and to analyze the role of cognitive reasoning and artificial intelligence (AI) in the formation of innovative therapeutic concepts.*

Materials and Methods. *The study employed systemic, epistemological, interdisciplinary, and prognostic approaches. To evaluate the role of AI, elements of the analysis of modern digital technologies in medicinal chemistry were applied.*

Results and Discussion. *The expediency of distinguishing the in cerebro stage as the primary cognitive level of drug discovery has been substantiated. It has been established that in cerebro is not an alternative to traditional methods of medicinal chemistry but rather serves as their methodological foundation. It is demonstrated that the implementation of the in cerebro concept may potentially reduce the duration of the early stages of drug development, decrease the number of non-promising syntheses, and optimize financial expenditures.*

Special attention is devoted to the role of AI as a tool for the cognitive enhancement of the researcher. It has been determined that AI systems are capable of expanding the space for hypothesis generation; however, they cannot replace human critical thinking, intuition, and scientific reflection.

Conclusions. *The in cerebro concept is proposed as a new methodological paradigm in medicinal chemistry and rational drug design, describing the cognitive stage of scientific concept formation prior to its computational and experimental verification. It is shown that the application of the in cerebro method allows reconsideration of the researcher's role as the central carrier of conceptual thinking and the integrator of interdisciplinary knowledge. It has been established that the future development of medicinal chemistry will largely depend on the combination of human cognitive potential with AI capabilities within a new model of hybrid scientific reasoning.*

KEY WORDS: **in cerebro; medicinal chemistry; drug design; cognitive modeling; artificial intelligence; in silico; methodology of science.**

Дата першого надходження статті до видання: 30.04.2026
Дата прийняття статті до друку після рецензування: 11.05.2026
Дата публікації (оприлюднення) статті: 27.05.2026