

ПРОГНОЗ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ОСНОВНИХ БАГ ЛІСТЯ *RUBUS CHAMAEMORUS*

Ал Хажжж Хассан Зу Ел Фікар, Комісаренко А.М., Маслов О.Ю.
Національний фармацевтичний університет, м. Харків, Україна

Вступ. З літературних даних відомо про застосування листя *R. chamaemorus* в народній медицині як засіб який має в'яжучу, кровоспинну, сечогінну, протизапальну та ранозагоювальну дію, всі виділені індивідуальні сполуки є перспективними для оцінки фармакологічного потенціалу методами *in silico* та в подальших експериментальних дослідженнях. За даними літератури відомо, що в *R. chamaemorus* містяться аглікони та О-глікозиди флавоноїдів [1, 2].

Матеріали та методи. Оцінку *in silico* спектрів біологічної активності сполук було отримано з використанням комп'ютерної програми PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances, версія 2020 Refined), яка прогнозує 1897 фармакологічних ефектів та механізмів дії із середньою точністю 97%. Прогноз здійснюється на основі аналізу взаємозв'язків «структура-активність» навчальної вибірки, що містить понад 1,3 млн. речовин з експериментально встановленою біологічною активністю. Для оцінки фармакологічного потенціалу сполук, ідентифікованих у листі *R. chamaemorus*, ми використовували параметр високої точності $P_a > 0,9$.

Результати та їх обговорення. При плануванні експериментальних досліджень загальною рекомендацією є послідовне дослідження різних прогнозованих видів біологічної активності, від найімовірніших до менш ймовірних. Ряд передбачених з високою ймовірністю видів активності вказує на перспективність вивчення можливості застосування цих сполук як фармакологічні речовини з антидіабетичною та хемопреентивною дією, які раніше не були встановлені для екстрактів з плодів *R. chamaemorus*. Враховуючи перспективність вивчення оригінальних природних сполук як потенційних лікарських засобів, проведене у цій роботі виявлення нових можливих фармакологічних ефектів вторинних метаболітів з листя *R. chamaemorus* робить внесок у розвиток фітохімічних досліджень у цій галузі.

Список літератури:

1. Kaisu M., Afaf K., Törrönen A.R. Identification and Quantification of Phenolic Compounds in Berries of *Fragaria* and *Rubus* Species (Family *Rosaceae*). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2004. Vol. 52. No. 20. P. 6178-6187.
2. Häkkinen S.H., Kärenlampi S.O., Heinonen I.M., Mykkänen H.M., Törrönen A.R. Content of the Flavonols Quercetin, Myricetin, and Kaempferol in 25 Edible Berries. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 1999. Vol. 47. No. 6. P. 2274-2279.