

СКРИНІНГ ФАРМАКОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ МЕТОДОМ *IN SILICO* БАР ТРАВИ ШАБЕЛЬНИКА БОЛОТНОГО

Гогер Хасан Баран, Комісаренко А.М., Маслов О.Ю.,

Національний фармацевтичний університет, м. Харків, Україна

Вступ. Природні сполуки є важливим джерелом для пошуку та розробка нових лікарських препаратів. В даний час є доцільним створення засобів рослинного походження, оснований на обмеженій кількості компонентів з добре відомими структурами та спектрами біологічної активності. На жаль, незважаючи на високу ефективність описаного підходу, він практично не застосовується в Україні. Актуальними є дослідження, спрямовані на подолання цього відставання і створіння рослинних субстанцій для отримання лікарських препаратів з добре відомим складом і біологічної активністю.

Матеріали та методи. У комп'ютерній програмі PASS використаної в ході даного дослідження, цей зв'язок охарактеризована наявністю або позитивної або від негативної кореляції між структурою дослідженої сполуки та його можливої біологічної активністю (P_a (probability "to be active") і P_i (probability "to be inactive"). Для оцінки фармакологічного потенціалу сполук, ідентифікованих у траві шабельника болотного, ми використовували параметр високої точності $P_a > 0,9$.

Результати та їх обговорення. Показані хімічні профілі біологічної активності виявлених сполук дають можливість розглядати їх як перспективні молекулу для подальших фармакологічних досліджень на моделях *in vitro* та *in vivo*, що в майбутньому може служити основою для отримання нових ефективних і безпечних ліків і продуктів функціонального харчування.

Види попередньо прогнозованої фармакологічної активності

Фармакологічна активність по результатам комп'ютерного прогнозу	Результати прогнозування $P_a \geq 0,9$
Інгібітор монофенолмонооксигенази	0,975
Поглинач вільних радикалів	0,971
Агоніст цілісності мембран	0,965
Гепатопротектор	0,962
Хемопревентивне	0,960
Кардіопротектор	0,957
Інгібітор проникності мембран	0,952
Антиканцерогенне	0,942
Підсилювач експресії TP53	0,942
Інгібітор ліпідів пероксидази	0,930