

# ПРОГНОЗ ФІТОТЕРАПЕВТИЧНОГО ЕФЕКТУ ЗАЛЕЖНО ВІД СКЛАДУ БАГАТОКОМПОНЕНТНОГО ЕКСТРАКТУ КОМПЛЕКСНОЇ ДІЇ

Шмалько О. О., Вишневська Л. І.\*

Чорноморський національний університет імені Петра Могили,  
м. Миколаїв, Україна

\*Національний фармацевтичний університет, м. Харків, Україна

**Вступ.** Протизапальна дія поліфенолів лікарської рослинної сировини (ЛРС) відома давно. Реалізація протизапальної активності поліфенолів, зокрема флавонолів, можлива і через інгібування синтази оксиду азоту (inducible NO synthase iNOS) та відповідного пригнічення вироблення оксиду азоту, що є одним із напрямів при лікуванні виразкового коліту [1]. Роль саме природних поліфенолів у корекції запальних захворювань кишечника є визнаною та характеризується безліччю молекулярних механізмів реалізації протизапального ефекту [2]. Можливість мультифакторного впливу поліфенолів на різні біомішені у деяких випадках не дозволяє чітко охарактеризувати механізм фармакологічної дії та визначити бажані параметри для селективності їх дії. Наукові досягнення останніх десятиліть щодо молекулярних технологій та виділення макромолекул, встановлення їх кристалічної будови і амінокислотного складу активних сайтів, з особливостями конформаційного розміщення ліганду у рецепторі або ферменті, розроблений арсенал *in silico* методів для прогнозування афінності ліганда до рецептора дозволяють передбачити можливість того чи іншого впливу на біомішень та відповідну фармакологічну відповідь.

**Мета дослідження.** З метою розробки нового комбінованого препарату з протизапальною активністю для лікування коліту, проведено докінг основних діючих речовин ЛРС до біомішеней – ліпооксигенази-5 та циклооксигенази-2, як фундаментальних прозапальних ензимів.

**Матеріали і методи.** Бібліосемантичний аналіз, *in silico*.

**Результати та їх обговорення.** Для дослідження було обрано 13 видів рослин з представників флори України, які за результатами бібліосемантичних досліджень володіють, зокрема, протизапальною дією та застосовуються в офіційній або народній медицині.

**Висновки.** Для подальших *in vitro* та *in vivo* досліджень та оптимізації складу комплексного рослинного лікарського засобу з протизапальною активністю обрано лікарські рослини з найвищим вмістом перспективних за результатами докінгу БАР: оман високий, цикорій дикий, грицики звичайні, фенхель звичайний, хвощ польовий, вероніка лікарська.

## Список літератури.

1. Arya V. S., Kanthlal S. K., Geevarghese L. The role of dietary polyphenols in inflammatory bowel disease: A possible clue on the molecular mechanisms involved in the prevention of immune and inflammatory reactions. *J. Food Biochem.* 2020; 44:e13369. <https://doi.org/10.1111/jfbc.13369>
2. Asakura H., Kitahora T. Chapter 23 - Antioxidants and Polyphenols in Inflammatory Bowel Disease: Ulcerative Colitis and Crohn Disease. *Polyphenols: Prevention and Treatment of Human Disease (Second Edition)*, 2018. P. 279-292.