

Д.В. Тарасовец, В.А. Терлецкая
**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ IN SILICO АКТИВНОСТИ БИОЛОГИЧЕСКИ
АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ БЕЛОКУДРЕННИКА ЧЁРНОГО (B.NIGRA)**

Научный руководитель: канд. фарм. наук, доц. Р.И. Лукашов
*Кафедра фармацевтической химии с курсом курсом повышения квалификации
и переподготовки*
Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск

D.V. Tarasovets, V.A Tsiarletskaia
**PREDICTION OF BIOLOGICAL ACTIVITY IN SILICO ACTIVE SUBSTANCES
OF BLACK WHITEFISH (B.NIGRA)**

Tutor: PhD, associate professor R.I. Lukashou
*Department of Pharmaceutical Chemistry with Course of Advanced Training
and Retraining*
Belarusian State Medical University, Minsk

Резюме. Проведено исследование биологически активных веществ, содержащихся в белокудреннике чёрном: хлорогеновой кислоты, кверцетина, гиперозида, баллотетроза. Установлено гемостатическое, антигипоксическое, желчегонное, гепатопротекторное действие, что является новыми видами активностей в дополнение к уже известным в литературе и открывает новые перспективы для исследований *in vivo*.

Ключевые слова: Белокудренник чёрный, PASS-online, фенольные соединения, фенилпропаноиды, фармакологическая активность.

Resume. The study of biologically active substances contained in ballota nigra was carried out: chlorogenic acid, quercetin, hyperoside, ballotetroside. Hemostatic, antihypoxic, choleric, hepatoprotective action was established, which is a new type of activity in addition to those already known in the literature and opens new prospects for *in vivo* studies.

Keywords: Ballota nigra, PASS-online, phenolic compounds, phenylpropanoids, pharmacological activity.

Актуальность. Белокудренник чёрный – растение семейства Яснотковые, обладающее ресурсным потенциалом на территории Республики Беларусь. Для многих представителей семейства яснотковые (таких как мята, Melissa, шалфей, чабрец и пустырник) характерны разнообразные фармакологические свойства: седативное, спазмолитическое, желчегонное, антимикробное. Исходя из сходства химического состава, можно предположить, что данное растение будет обладать схожими свойствами[4]. Поэтому для оценки возможности использования белокудренника чёрного как источника получения лекарственного растительного сырья необходимо провести исследование фармакологической активности биологически активных веществ (БАВ), содержащихся в объекте исследования.

Цель: провести компьютерное прогнозирование фармакологической активности биологически активных веществ белокудренника чёрного.

Задачи:

1. Определить фармакологическую активность веществ, входящие в состав белокудренника чёрного.

2. Соотнести данные, полученные методом компьютерным моделированием с уже известными и опубликованными активностями *in vivo*.

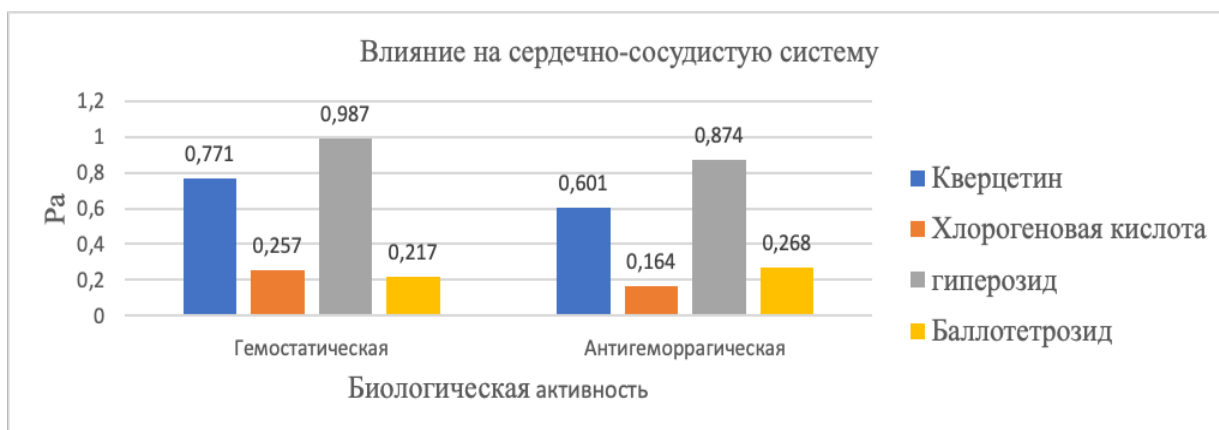
Материалы и методы. Для прогнозирования активности выбраны 4 БАВ:

1. Хлорогеновая кислота – гидроксикоричная кислота;[3]
2. Кверцетин – флавоноид;[3]
3. Гиперозид – флавоноид;[3]
4. Баллотетрозид – фенилпропаноид.[5]

Для прогнозирования активности использовался Интернет-ресурс – PASS-online [7]. Для прогнозирования предполагается, что фармакологическая активность зависит от структуры определяемого вещества и его физико-химических свойств. Данные об активности представляются следующим образом: P_a (наличие активности) и P_i (отсутствие активности). Результат считается значимым, если $P_a > 0,5$ и $P_a > P_i$.

Результаты и их обсуждение. Результаты прогнозирования влияния на систему крови.

PASS прогнозирует у изучаемых соединений следующие влияния на сердечно-сосудистую систему *гемостатическая активность* для кверцетина и гиперозида; *антигеморрагическая* для кверцетина и гиперозида (диаграмма 1).

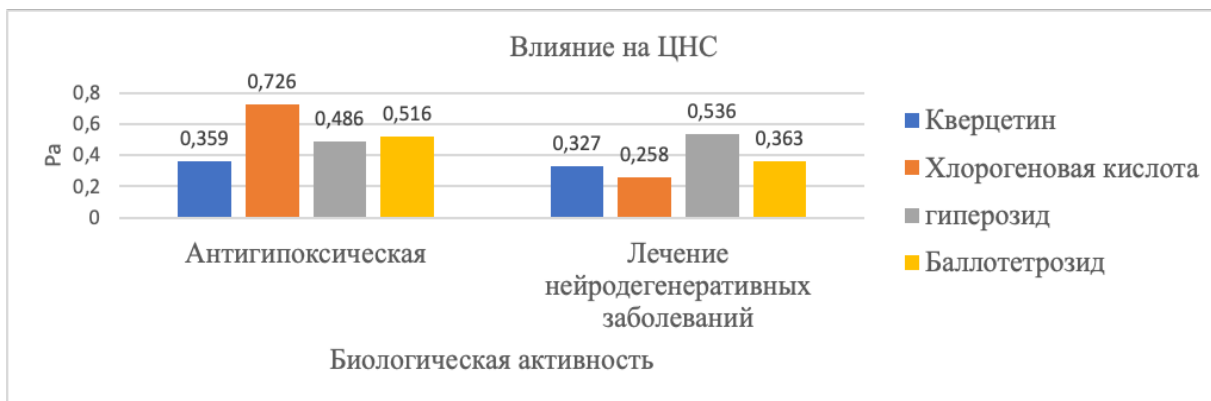


Диагр. 1 – Прогнозирование влияния на сердечно-сосудистую систему

По некоторым исследованиям у пациентов с гипертонией 1 типа приём кверцетина оказывал снижение систолического и диастолического давления. У испытуемых с предгипертензией артериальное давление после приёма кверцетина не изменялось. [6]

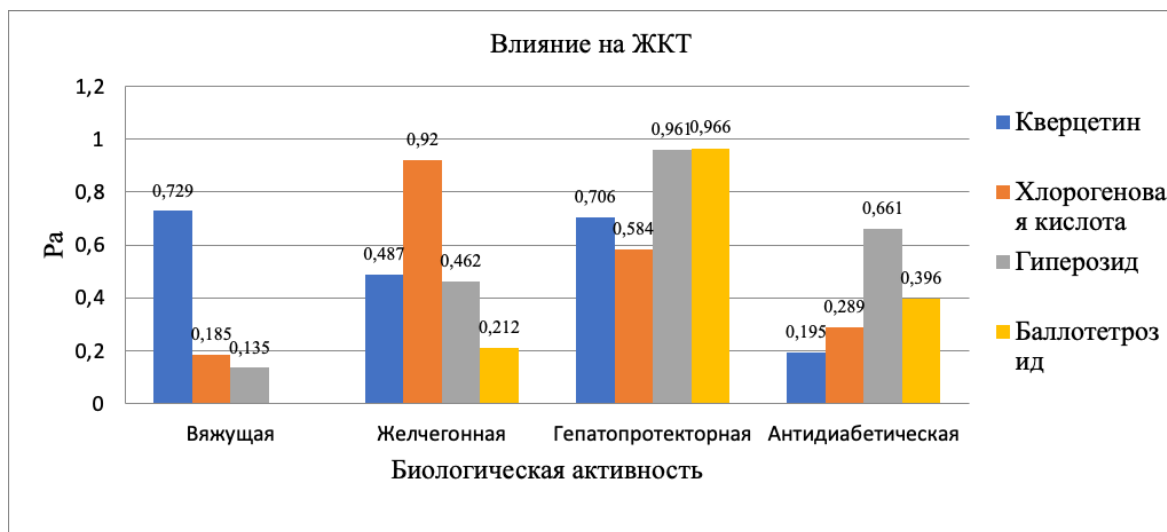
Также имеются данные о снижении уровня глюкозы в крови у крыс альбиносов [8]

Результаты прогнозирования влияния на центральную нервную систему (ЦНС). *Антигипоксической активностью* могут обладать хлорогеновая кислота и баллотетрозид, а также гиперозид при лечении *нейродегенеративных заболеваний*. (Диаграмма 2).



Диагр. 2 – Прогнозирование влияния на центральную нервную систему (ЦНС)

Результаты прогнозирования влияния на желудочно-кишечный тракт (ЖКТ). Наиболее активным является гиперозид, для которого вероятны 2 вида активности с $P_a > 0,5$: гепатопротекторная, антидиабетическая; хлорогеновая кислота с 2 предполагаемыми видами активности: желчегонная и гепатопротекторная; кверцетин с 2 вероятными видами активности: вяжущая и гепатопротекторная. Для баллотетрозида возможна гепатопротекторная активность. (диаграмма 3)



Диагр. 3 – Прогнозирование влияния на желудочно-кишечный тракт (ЖКТ)

Выводы:

1. Результаты исследования показывают разнообразную фармакологическую активность: гемостатическую, антигипоксическую, желчегонную, гепатопротекторную.
2. Установлено наличие дополнительных видов активности к уже опубликованным в литературе, что даёт перспективы для новых исследований *in vivo*.

Литература

1. Государственная Фармакопея Республики Беларусь / Министерство здравоохранения Республики Беларусь; Республиканское унитарное предприятие «Центр экспертиз и испытаний в здравоохранении». – 2-е изд. – Т.2: Контроль качества субстанций для фармацевтического использования и лекарственного растительного сырья. – Минск, 2016. – 1367 с.

2. European Pharmacopeia / European Directorate for the quality of medicines and healthcare. – 8-th edition, Supplement 8.0. – Vol. 1. – Council of Europe, Strasbourg, 2008. – 1456 p.
3. Тарасовец, Д. В. Качественный анализ водно-спиртовых извлечений из травы белокудренника чёрного методом тонкослойной хроматографии / Д. В. Тарасовец, Е. В. Городко, В. А. Терлецкая // Сборник тезисов Международного молодежного научного форума «Медицинская весна 2024», Сеченовский университет, Москва, 16-17 мая 2024 г. – Москва, 2024. (в печати).
4. D A Daels-Rakotoarison 1, V Seidel, B Gressier, C Brunet, F Tillequin, F Bailleul, M Luycckx, T Dine, M Cazin, J C Cazin. Neurosedative and antioxidant activities of phenylpropanoids from *ballota nigra*. *Arzneimittelforschung*. 2000 Jan;50(1):16-23.
5. V Seidel 1, M Verholle, Y Malard, F Tillequin, J C Fruchart, P Duriez, F Bailleul, E Teissier. Phenylpropanoids from *Ballota nigra* L. inhibit in vitro LDL peroxidation. *Phytother Res*. 2000 Mar;14(2):93-8.
6. Чиряпкин А.С., Золотых Д.С., Поздняков Д.И. Обзор биологической активности флавоноидов: кверцетина и кемпферола // *Juvenis scientia*. 2023. Том 9. №2. С.5-20.
7. PASS online [Electronical resource]. – Mode of access: way2drug.com/passonline.html. – Date of access:30.11.2023.
8. Nusier, M.K., H.N. Bataineh, Z.M. Bataineh, and H.M. Daradka. 2007a. Effects of *Ballota nigra* on blood biochemical parameters and insulin in albino rats. *Neuroendocrinal. Lett*. 28(4) 473-476.