



УДК 615.1:378

## МОДЕЛЮВАННЯ GERIATРИЧНОГО ЛІКАРСЬКОГО ЗАСОБУ, ЩО ПРИГНІЧУЄ СИНТЕЗ АДІПОНЕКТИНУ

Студ. Д.І. Данилко  
Студ. А.-М. Кравець  
Студ. Е.І. Іващенко

Наук. керівник доц. В.І. Бессарабов

Київський національний університет технологій та дизайну

Адипонектин – білок, який підвищує чутливість до інсуліну, зменшує вміст глюкози в крові і рівень тригліцеридів, сприяє спалюванню жиру, а також володіє ще і протизапальною і антиканцерогенною дією. Він впливає на вуглеводний і ліпідний обміни, бере участь в регуляції кров'яного тиску, запобігає виникненню запальних процесів в ендотелії кровоносних судин, пом'якшує ушкодження, що виникають при ішемії і реперфузії серцевого м'яза. У людей з надмірною вагою експресія адипонектину знижена в плазмі крові, що призводить до розвитку резистентності до інсуліну, цукрового діабету 2 типу та в кінцевому підсумку до розвитку метаболічного синдрому.

Метаболічний синдром - це комплекс метаболічних, гормональних порушень, які є факторами ризику розвитку серцево-судинних захворювань.

Рівень адипонектину обернено пропорційно пов'язаний зі ступенем ожиріння - це значить, що чим нижчий рівень адипонектину, тим більше жирових відкладень утворюється.

Для дослідження було використано доступні бази фізико-хімічних даних PubChem. В перший етап дослідження включено 65 субстанцій, які аналізували на ймовірність активації гену ADIPOQ окремо за даними білку та мРНК. Виділяли речовини з максимально ймовірною активністю ( $P_a$ ). Користувалися методом «Прогнозування активності спектрів речовини» (PASS), середня точність прогнозу становила близько 95% (LOOCV).

Дослідження дозволило виділити перспективні субстанції, які ймовірно максимально підвищують експресію адипонектину. А саме:

- пікамілон (за білком  $P_a=0,763$ , за мРНК  $P_a=0,761$ ),
- екстракт меліси (*Melissa officinalis*) – 2,5-дигідроксибензойну кислоту (за білком  $P_a=0,592$ , за мРНК –  $P_a=0,569$ ),
- саліцилову кислоту (за білком  $P_a=0,680$ );
- екстракт глоду (*Crataegus*) – винну кислоту (за білком  $P_a=0,674$ ),
- лимонну кислоту (за білком  $P_a=0,808$ );
- екстракт валеріани (*Valeriana officinalis*) – ізовалеріанову кислоту (за білком  $P_a=0,607$ ), валеріанову кислоту (за білком  $P_a=0,653$ )

Таким чином, розроблений *in silico* препарат має включати: пікамілон, екстракт валеріани сухий, екстракт меліси сухий, екстракт глоду сухий.

Отже, запропонований склад геріатричного препарату, який підвищує експресію адипонектину (за ознакою активації гену ADIPOQ), є перспективним для подальшого дослідження фармакологічних, біофармацевтичних властивостей і розробки лікарських форм.