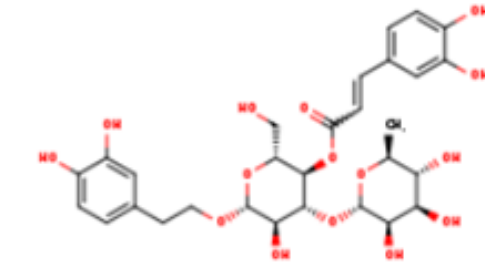




# Параметры биодоступности вербаскозида

Авторы: Городко Е.В., студент 3 курса, Терлецкая В.А., аспирант.

Научный руководитель: Лукашов Р.И., кандидат фармацевтических наук, доцент, заведующий кафедрой фармацевтической химии с курсами повышения квалификации и переподготовки



## Цели исследования:

In silico определить физико-химические свойства и фармакокинетические параметры вербаскозида.

## Задачи:

### Сделать оценку:

- токсичности
- биодоступности
- проницаемости через кожные покровы и гематоэнцефалический барьер
- абсорбция в желудочно-кишечном тракте
- растворимости

## Результаты исследования:

### Растворимость в воде

Log S (ESOL)	-2,87
Растворимость	8,36e-01 мг/мл ; 1,34e-03 моль/л
класс растворимости	растворимый
Log S (Ali)	-4.18
Растворимость	4,09e-02 мг/мл ; 6,55e-05 моль/л
Класс растворимости	Умеренно растворимый

### Физико-химические свойства

Формула	C <sub>29</sub> H <sub>36</sub> O <sub>15</sub>
Молекулярная масса	624,59 г/моль
Количество тяжелых атомов	44
Количество ароматических тяжелых атомов	12
Доля Csp <sup>3</sup>	0,48
Кол-во вращающихся связей	11
Число акцепторов Н-связей	15
Количество доноров Н-связей	9
Молярная рефрактивность	148,42
Топологическая площадь полярной поверхности	245.29 Å <sup>2</sup>

### Липофильность

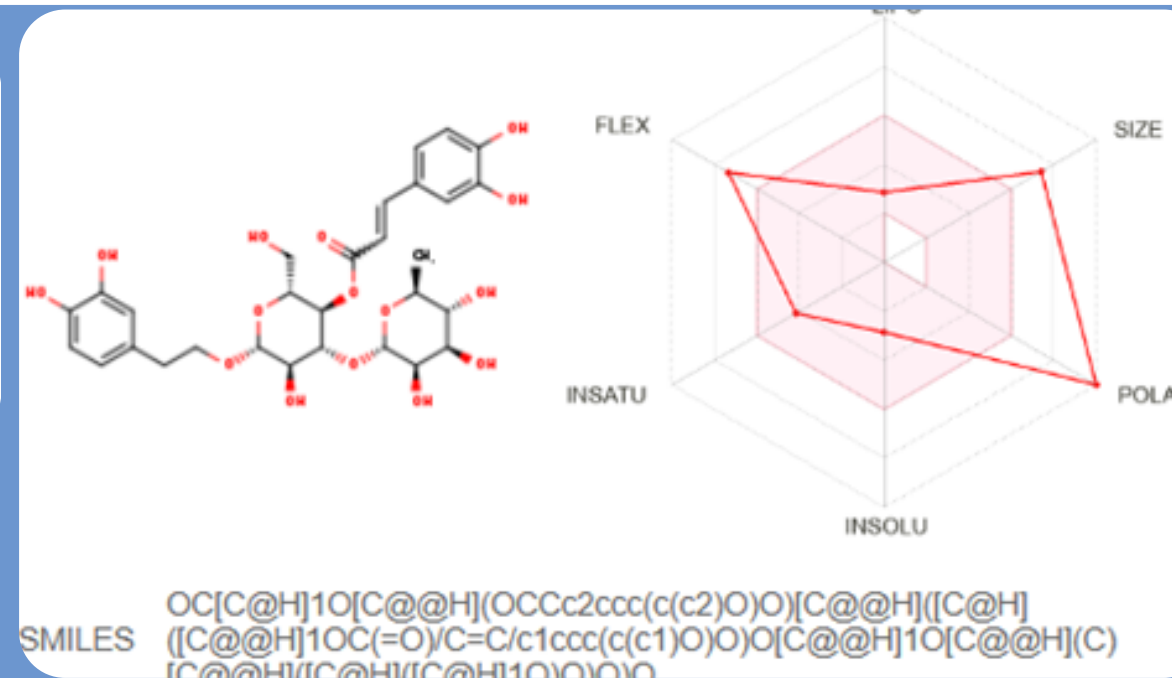
Log Po/w (iLOGP)	2,15
Log Po/w (XLOGP3)	-0,5
Log Po/w (WLOGP)	-1,12
Log Po/w (MLOGP)	-2,37
Log Po/w (SILICOS-IT)	-1.14
Консенсус Log Po/w	-0,6

### Близость к лекарству

Липински	Нет; 3 нарушения
Госе	Нет; 4 нарушения
Вебер	Нет; 2 нарушения
Иган	Нет; 1 нарушение
Муеге	Нет; 4 нарушения
Оценка биодоступности	0,17

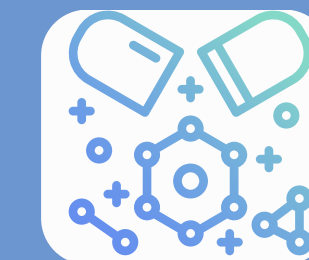
### Фармакокинетика

Гастроинтестинальная абсорбция	Низкая
Проницаемость через BBB	нет
Субстрат Р-гликопротеина	да
Ингибитор цитохрома P450 1A2	нет
Ингибитор цитохрома P450 2C19	нет
Ингибитор цитохрома P450 2C9	нет
Ингибитор цитохрома P450 2D6	нет
Ингибитор цитохрома P450 3A4	нет
Проницаемость кожи	-10,46 см/с



## Материалы и методы:

использовали сервис SwissADME



## Основные выводы

- Вербаскозид не оказывает токсических или других нежелательных побочных эффектов из-за нормального клиренса и отсутствия накопления препарата или его метаболитов
- Вербаскозид относится к классу растворимых соединений
- Вербаскозид, как прогнозируется, обладает низкой биодоступностью при приеме внутрь вследствие большого размера и высокой полярности. Вербаскозид по своим физико-химическим свойствам не соответствует критериям Липински, Вебера, Эгана, Муег и Гоуза. Значит соединение не обладает теоретически высокой биодоступностью при пероральном приеме
- Вербаскозид имеет низкую проницаемость через кожные покровы и не проникает через гематоэнцефалический барьер
- У вербаскозида пассивная абсорбция в желудочно-кишечном тракте низкая