### Наукове періодичне видання

# МЕДИЧНИЙ ФОРУМ

Науковий журнал

# 25 (25) 2022

Львів 2022

# Наукове періодичне видання **Медичний форум**

Науковий журнал

# 25 (25) 2022

Редактор, коректор – Римарчук Л.Г. Верстка-дизайн – Литвиненко А.О.

Відповідальність за підбір, точність наведених на сторінках журналу фактів, цитат, статистичних даних, дат, прізвищ, географічних назв та інших відомостей, а також за розголошення даних, які не підлягають відкритій публікації, несуть автори опублікованих матеріалів. Редакція не завжди поділяє позицію авторів публікацій. Матеріали публікуються в авторській редакції. Передрукування матеріалів, опублікованих в журналі, дозволено тільки зі згоди автора та видавця. Будь-яке використання— з обов'язковим посиланням на журнал.

Свідоцтво про державну реєстрацію: КВ № 20513-10313Р від 20 грудня 2013 р. Засновник журналу: «Львівська медична спільнота»

Видавник: «Львівська медична спільнота» 79000, м. Львів, а/с 6153 www.medicinelviv.org.ua E-mail: journal@medicinelviv.org.ua Телефон: +38 099 415 06 39

#### **3MICT**

Borysiuk I. Yu., Tsisak A. A., Valivodz I. P., Ahmed Moustafa Hassan Ibrahim, Akisheva A. S. PREDICTION OF THE ANTICONVULSANT ACTIVITY OF OCIMUM BASILICUM LEAF ESSENTIAL OIL USING IN SILICO METHOD
<b>Вінтонів О. Р., Гродзінський В. І.</b> ВЛИВ ЕПІДЕМІОЛОГІЧНИХ ФАКТОРІВ ТА ПОКАЗНИКІВ СПЕЦІАЛІЗОВАНОЇ ДОПОМОГИ ХВОРИМ
Геліч К. Р., Цисар Ю. В. ОСОБЛИВОСТІ ПЕРЕБІГУ ВАГІТНОСТІ І ПОЛОГІВ У ЖІНОК З НЕРВОВО-М'ЯЗЕВИМИ РОЗЛАДАМИ: ОГЛЯД ДАНИХ ЛІТЕРАТУРИ
Дзевульська І. В., Маліков О. В. ДЕЯКІ ІСТОРИЧНІ ДАНІ ЩОДО ВІДКРИТТЯ ЕНДОКРИННИХ ЗАЛОЗ ТА ЇХ ГОРМОНІВ
<b>Кимович Я. Я., Цисар Ю. В.</b> ПІСЛЯПОЛОГОВА КРОВОТЕЧА (ОГЛЯД СУЧАСНОЇ ЛІТЕРАТУРИ)
Костів Ю. Я., Цисар Ю. В. ПІСЛЯПОЛОГОВА ІНФЕКЦІЯ (ДАНІ СУЧАСНОЇ ЛІТЕРАТУРИ)
<b>Кривецька І. І., Хованець К. Р.</b> ЛІКУВАННЯ РОЗСІЯНОГО СКЛЕРОЗУ В УКРАЇНІ
<b>Кривецька І. І., Хованець К. Р.</b> СУЧАСНІ ЛІТЕРАТУРНІ ДАНІ ЩОДО ПОРУШЕННЯ МОЗКОВОГО КРОВООБІГУ ЗА ГЕМОРАГІЧНИМ ТИПОМ, ЕТІОЛОГІЯ ТА КЛІНІКА
<b>Кривецька І. І., Хованець К. Р.</b> РОЗВИТОК НЕВРИТУ ЛИЦЕВОГО НЕРВА
<b>Кривецька І. І., Хованець К. Р.</b> АНГІОМИ ТІЛ ХРЕБЦІВ
Вайнагій О. М., Кузіна А. В. ДОСЛІДЖЕННЯ МАСТОЇДИТУ ТА ЙОГО РОЛІ У РОЗВИТКУ ЕНЦЕФАЛІТУ, ПАРЕЗУ ЛИЦЕВОГО НЕРВА ТА ДЕСТРУКТИВНИХ ЗМІН КІСТОК ЧЕРЕПА
Попюк В. В., Цисар Ю. В. ОСНОВНІ СУЧАСНІ ПРИНЦИПИ ПРОФІЛАКТИКИ ВЕНОЗНИХ ТРОМБОЕМБОЛІЧНИХ УСКЛАДНЕНЬ В АКУШЕРСТВІ ТА ГІНЕКОЛОГІЇ (ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ)
<b>Равлів Ю. А.</b> ВИЗНАЧЕННЯ КОЕФІЦІЄНТА ДОСТУПНОСТІ ТА КОЕФІЦІЄНТА АДЕКВАТНОСТІ ПЛАТЕСПРОМОЖНОСТІ В УКРАЇНІ ТА ПОЛЬЩІ ТОНОМЕТРІВ
Сухомлин А. А., Гордієнко Л. П., Сухомлин Т. А. ПАТОЛОГІЧНІ ПРОЦЕСИ У ОРГАНАХ ПОРОЖНИНИ РОТА ТА ЇХ КОРЕКЦІЯ ПРОБІОТИКАМИ ТА МЕЛАНІНОМ (ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ)
(Отлидлитили тир

Фецик Т. Г., Цисар Ю. В.	
<b>Фецик Т. Г., Цисар Ю. В.</b> СУЧАСНИЙ ПОГЛЯД НА ПРОБЛЕМУ ЗАГРОЗИ	
ПЕРЕДЧАСНИХ ПОЛОГІВ У ВАГІТНИХ З АНЕМІЄЮ	
(ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ)	62
Цап М. М., Цисар Ю. В.	
ВАГІНАЛЬНИЙ КАНДИДОЗ:	
СУЧАСНА ТАКТИКА ДІАГНОСТИКИ, СПОСТЕРЕЖЕННЯ ТА ВЕДЕННЯ	66

#### Borysiuk I. Yu.,

PhD of Pharmacy, Associate Professor Odesa National Medical University

#### Tsisak A. A.,

PhD of Biology, Associate Professor, Head of the Department of Drugs Technology Odesa National Medical University

#### Valivodz I. P.,

PhD of Biology, Assistant at the Department of Drugs Technology Odesa National Medical University

#### Ahmed Moustafa Hassan Ibrahim,

Student at the Department of Drugs Technology Odesa National Medical University

#### Akisheva A. S.,

Assistant at the Department of Drugs Technology Odesa National Medical University

## PREDICTION OF THE ANTICONVULSANT ACTIVITY OF OCIMUM BASILICUM LEAF ESSENTIAL OIL USING IN SILICO METHOD

The paper examines the analysis of the structure of essential oil of *Ocimum basilicum* using PASS-forecast. The interest in the study and introduction of herbal medicines into medical practice is not accidental. It is known that herbal medicines can affect various links in the pathogenesis, have a beneficial effect on the CNS as a whole, which significantly reduces the risk of so-called epileptic personality disorders. The paper considers the spectrum of biological activities aimed at studying the anticonvulsant

Key words: anticonvulsant activity, pharmacotherapy, epilepsy, essential oil.

У роботі розглядається аналіз структури ефірної олії *Ocimum basilicum* за допомогою PASS-прогнозу. Інтерес до вивчення та впровадження в медичну практику фітопрепаратів не випадковий. Відомо, що фітопрепарати можуть впливати на різні ланки патогенезу, сприятливо впливати на ЦНС в цілому, що значно знижує ризик виникнення так званих епілептичних розладів особистості. У роботі розглянуто спектр біологічної активності, спрямований на вивчення протисудомного потенціалу ефірної олії оцимум базилікум.

Метою дослідження є прогнозування біологічної активності речовин Ocimum basilicum L. in silico методом.

Ключові слова: протисудомна активність, фармакотерапія, епілепсія, ефірна олія.

В работе рассматривается анализ структуры эфирного масла *Ocimum basilicum* с помощью PASS-прогноза. Интерес к изучению и внедрению в медицинскую практику фитопрепаратов не случаен. Известно, что фитопрепараты могут влиять на разные звенья патогенеза, оказывать благоприятное влияние на ЦНС в целом, что значительно снижает риск возникновения так называемых эпилептических расстройств личности. В работе рассмотрен спектр биологической активности, направленный на изучение противосудорожного потенциала эфирного масла оцимума базиликума.

Ключевые слова: противосудорожная активность, фармакотерапия, эпилепсия, эфирное масло.

**Introduction.** Neuropsychiatric diseases, neuroses – occupy a leading place in the list of common diseases of mankind. Stress, illness, poor diet and unhealthy lifestyles are all the foundations of such diseases. The above determines the relevance of the development and introduction to the market of new drugs aimed at pharmacotherapy and pharmacocorrection of these conditions.

The main principle of pharmacocorrection of neuroses is the appointment of sedatives, anxiolytics, of which the best use of herbal medicines, because they have fewer side effects.

According to the WHO, epilepsy is one of the most common CNS diseases. Epilepsy is treated with several methods, the main of which is the use of antiepileptic drugs with specific mechanisms of action. Among the arsenal of drugs used to treat this neurological pathology, the market of Ukraine and other countries are drugs of synthetic origin. Unfortunately, currently available antiepileptic drugs are not able to control the course of the disease in almost every second patient; their use is accompanied by a variety of side effects from minimal CNS disorders to death due to liver dysfunction or changes in blood counts. One of the promising areas of development of drugs for the treatment of epilepsy is the use of phytotherapeutic agents, which has become the task of our work. It is known that herbal medicines can affect various links in the pathogenesis, have a beneficial effect on the CNS as a whole, which significantly reduces

the risk of so-called epileptic personality disorders. Analysis of literature sources, search, development of new phytotherapeutic drugs with a wide range of pharmacological activity, selection of methods for assessing anticonvulsant activity is appropriate and justified.

A great number of scientists and organizations turn their attention to traditional therapies in order to find and conserve important resources (Akerele, 1990). However, medicinal plants have been an important source of new drugs with biological activity [1, p. 1].

A particularly promising field of phytotherapeutic agents are aromatic plants. Several species of aromatic plants are used medicinally because of their volatile oils or chemical components. In particular, some of them possess certain CNS properties, including antiepileptic action and have been traditionally used for a long time in folk medicine. Aromatic plants are at present widely studied for their large therapeutic potential and benefits. These benefits depend largely on essential oils which, in general terms, occur in many herbs. The essential oils of the plant are the essence of their fragrance. In general, the essential oils consist of chemical mixtures involving several tens to hundreds of different types of molecules. Only a few have a high percentage of a single component. These chemical constituents are divided into two broad classes: terpenes and phenylpropanoids [2, p. 2].

Based on the above, the object of our study is *Ocimum basilicum L*.

**The aim** of the study is to predict the biological activity of substances *Ocimum basilicum L. in silico* method.

Materials and methods. The following research methods were used to solve the tasks: to summarize the results of the analysis of literature and own experimental data; analysis, generalization, comparison, experiment, measurement, observation, mathematical statistics.

**Taxonomical classification** of *Ocimum basilicum L*.

Kingdom: Plantae.

Phylum: Magnoliophyta. Class: Magnoliopsida. Order: Lamiales. Family: Lamiacaea. Genus: Ocimum. Species: basilicum.

Ocimum is one of the most important genera of the family Lamiaceae, native to India, Southern Asia and Middle East. Cultivated extensively in Southern, Central and Eastern Europe, North Africa, and in the USA, particularly California (Kruger, 1992 and Singh and Panda, 2005). Economically, it is of great importance as a source of volatile aromatic oils, medicines and ornamentals. Ocimum basilicum L., commonly known as Sweet Basil. The name Basil is derived from Greek word basileus which means «king», because of the royal fragrance of this herb (Grieve, 1931) [6].

Ocimum basilicum (Lamiaceae) and other species of the same genus are used as medicines for the treatment of central nervous system (CNS) diseases [1, p. 2].

Ocimum basilicum L. (Lamiaceae) is an Egyptian plantused as a folkloric remedy in Egyptian traditional medicine. In the current study, the aerial part of this plant was used, and its essential oil was obtained

by hydrodistillation. The essential oil of *Ocimum basilicum* was studded for its composition and some CNS activities (viz., sedative, hypnotic, anticonvulsant, local anesthetic) [3 p. 2].

Due to different combinations of the essential oils, various varieties of O. basilicum differ in fragrance. Different chemo varieties are found in different regions of the world. According to one study, the essential oil composition of O. basilicum was eucalyptol (1.79%), linalool (12.63%),  $\alpha$ -terpineol (0.95%), eugenol (19.22%),  $\beta$ -elemene (2.68%),  $\alpha$ -bergamotene (3.96%),  $\alpha$ -guaiene (2.33%), germacrene O (8.55%), cubenol (1.78%), tau-cadinol (15.13%), camphor (0.70%), bornil acetate (1.97%),  $\rho$ -cariophylene (0.61%),  $\rho$ -cariophylene (0.33%), metil eugenol (0.76%),  $\rho$ -farnesene (0.58%), epibiciclosesquiphelandrene (0.76%), taumuralol (0.96%),  $\rho$ -bisabolol (0.35%),  $\rho$ -gurjunene (5.49%) and  $\rho$ -cadinene (5.04%).

It has been reported to be Antiviral, larvicidal, antinociceptive, antimicrobial. It has been used for thousands of years for the treatment of digestive and nervous disorders and has been found to be

Table 1
Prediction of the biological activity of substances
of the *O. basilicum* using PASS software

The same of the sa					
Formula	Pa	Pi	Activity		
Linalool	0,549	0,014	GABA aminotransferase inhibitor		
	0,340	0,180	Acetylcholine neuromuscular blocking agent		
	0,242	0,158	Anticonvulsant		
	0,113	0,055	NMDA receptor polyamine site antagonist		
Estragole	0,619	0,008	GABA aminotransferase inhibitor		
	0,670	0,006	Acetylcholine neuromuscular blocking agent		
	0,208	0,189	Anticonvulsant		
1,8-Cineole	0,400	0,048	GABA aminotransferase inhibitor		
	0,294	0,068	Skeletal muscle relaxant		
	0,289	0,127	Anticonvulsant		
	0,241	0,086	Muscle relaxant		
Geraniol	0,452	0,031	GABA aminotransferase inhibitor		
	0,352	0,171	Acetylcholine neuromuscular blocking agent		
	0,229	0,167	Anticonvulsant		

anthelmintic, antipyretic, stomachic, taste improving agent, cardioprotective and cure for blood diseases. It is also known for its use in different ailments such as muscle cramps, insecticidal, diabetes and respiratory disorders. It is active as an antioxidant, anti-inflammatory agent, feverish illness, nausea, migraine, abdominal cramps, gonorrhea, dysentery, headache, colic, dizziness, piles, cough, paralysis, nervous temperament and numbness. The essential oil is used for acne, snake bites and insect stings. It is known to be antitoxic and cure for kidney and respiratory ailments. Basil tea cures diarrhea, vomiting, constipation and for mental fatigue and hyssop for cough. The chemical composition of the essential oil of *O. basilicum* has been under study since 1930s and more than 200 chemical components have been identified [4, p. 2].

The major constituents of essential oil *O. basilicum* are linalool, geraniol, and 1,8-cineole and estragole.

Potential biological activity of components of *O. basilicum* was determined by virtual screening program PASS (Prediction of Activity Spectra for Substance).

Typically, computer simulations are used to predict the synthesis of new compounds or to predict the pharmacological activity of not yet synthesized compounds. However, the development of new approaches to predicting the anticonvulsant activity of compounds of plant origin based on structural

molecular characteristics proved to be an urgent issue. Given this, the analysis of the structure of substances of plant origin using PASS-forecast was relevant and interesting both from a scientific and practical point of view.

**Results**. The prediction result is presented as a list of activities with Pa and Pi approximation, which is constructed in descending order of dependence (Pa-Pi)> 0. Pa is an estimate of the probability of a compound to be active and inactive for each type of biological spectrum activity. Its values vary from 0,000 to 1,000.

With the help of PASS software, the anticonvulsant activity of individual compounds that are part of O. basilicum was predicted.

Essential oils (ÈO) might have anticonvulsant by interfering with GABAergic neurotransmission. We can see high predicted GABA aminotransferase inhibitor activity in all studded substances.

Anticonvulsant activity of linalool is through inhibition of glutamergic transmission and through suppression of voltage-gated currents.

Linalool is a competitive antagonist of NMDA receptors and blockade of the NMDA subtype of glutamate receptor has been reported to contribute to the antiepileptic.

**Conclusions.** The PASS software is an effective approach to the search for novel anticonvulsant agents.

#### References:

- 1. Oliveira, Juliana S. Phytochemical screening and anticonvulsant property of Ocimum basilicum leaf essential oil. Boletín Latinoamericano y del Caribe de Plantas Medicinales y Aromáticas, vol. 8, núm. 3, mayo, 2009, pp. 195–202.
- 2. Reinaldo Nóbrega de Almeida. Essential Oils and Their Constituents: Anticonvulsant Activity. *Molecules*. 2011. 16. Pp. 2726–2742.
- 3. M. Ismail. Central Properties and Chemical Composition of Ocimum basilicum Essential Oil. *Pharmaceutical Biology.* 2006. Vol. 44. No. 8. Pp. 619–626.
- 4. S. Khair-ul-Bariyah. Ocimum Basilicum: A Review on Phytochemical and Pharmacological Studies. *Pakistan Journal of Chemistry*. June 2012. Pp.78–85.
- 5. Sarfaraz Khan Marwat. Phytochemical Constituents and Pharmacological Activities of Sweet Basil-Ocimum basilicum L. (Lamiaceae). *Asian Journal of Chemistry*. 2011. Vol. 23. No. 9. P. 3773–3782.
- 6. Mohamed A. Nassar. Botanical Studies on Ocimum basilicum L. (Lamiaceae). *Research Journal of Agriculture and Biological Sciences*. 2013. 9(5). P. 150–163.
  - 7. The effects of herbal medicine on epilepsy/W. Liu, T. Ge, Z. Pan, Y. Leng. Oncotarget. 2017. № 8. P. 48385–48397.