

## **ОЦІНКА НА ОСНОВІ КВАНТОВО-ФАРМАКОЛОГІЧНОГО АНАЛІЗУ ПЕРСПЕКТИВ ЗАСТОСУВАННЯ ПОЛІНЕНАСИЧЕНИХ ЖИРНИХ КИСЛОТ ДЛЯ СТИМУЛЯЦІЇ ФІЗИЧНОЇ ПРАЦЕЗДАТНОСТІ**

**Гуніна Л.М.**

*Лабораторія стимуляції працездатності та адаптаційних реакцій у спорті вищих досягнень, Науково-дослідний інститут Національного університету фізичного виховання і спорту, Київ, Україна*

**Резюме.** На підставі результатів квантово-фармакологічних досліджень з аналізом атомної структури молекул показано, що основні представники родини поліненасичених омега-3-жирних кислот – ейкозапентаснова і докозагексаснова – мають виразні антиоксидантні і мембранопротективні властивості, що схожі з біоантиоксидантами каротиноїдами. Обговорюється можливість і доцільність застосування вітчизняного препарату на основі поліненасичених жирних кислот Епадолу в практиці підготовки спортсменів для стимуляції фізичної працездатності.

**Ключові слова:** квантово-фармакологічний аналіз, поліненасичені жирні кислоти, антиоксиданти, мембранопротектори, фізична працездатність

**Вступ.** Необхідність використання фармакологічних засобів ергогенної, тобто стимулюючої фізичну працездатність, спрямованості потребує більш глибоких знань стосовно особливостей впливу різноманітних лікарських засобів на організм спортсмена та окремі органи, системи, тканини тощо, особливо в умовах напруженої м'язової діяльності [1]. Саме визначення універсальних та локальних (молекулярних) механізмів дії того або іншого ергогенного фактору є першим етапом його подальшого впровадження у практику спортивної підготовки [2].

Існуючий на сьогодні перелік медикаментозних засобів, що застосовуються з метою зростання фізичної працездатності, є досить значним [2, 3]. Тому під час побудови обґрунтованої та ефективної схеми фармакологічної підтримки необхідні знання основних точок прикладання тих або інших препаратів, дієтичних добавок спеціального призначення та продуктів функціонального спортивного харчування. Отже, вирішення проблеми раціонального застосування сучасних високоефективних ергогенних засобів недопінгового характеру неможливе без проведення в цьому напрямі фундаментальних та прикладних наукових досліджень [4].

**Аналіз останніх досліджень та публікацій.** У сучасному спорті вищих досягнень з його неухильно зростаючим обсягом фізичних навантажень, виконання яких дуже часто супроводжується граничною мобілізацією функціональних можливостей організму спортсмена, наслідком чого є зниження фізичної працездатності та гальмування процесів відновлення. Ці стани, в свою чергу, в метаболічному сенсі ґрунтуються, насампе-

ред, на активізації процесів вільнорадикального або перекисного окиснення (ПОЛ), яке є першопричиною виникнення окисного (окисдатовного) стресу (ОС) [5].

За умов звичайних стресових ситуацій, незначної відносної гіпоксії при помірних фізичних навантаженнях активація ПОЛ обмежена, що забезпечується постійним функціонуванням достатньо надійної антиоксидантної системи, яка протидіє ліпопероксидації в усіх ланках [3, 6]. Проте характерні для спорту вищих досягнень понадінтенсивні фізичні навантаження викликають значну активацію ПОЛ [7]. Руйнування накопиченими у процесі ПОЛ вільними радикалами клітинних мембран – один з важливих чинників стомлення з порушенням ресинтезу АТФ і перебігу відновлювальних процесів. Пригнічення активності ферментних систем, зокрема, антиоксидантних та детоксикаційних, яке відбувається, подовжує період відновлення після тренувальних занять, що ускладнює формування необхідного рівня фізичної працездатності [8, 9].

Основною групою препаратів, що протидіють ОС, є, по-перше, саме антиоксидантні засоби, які безпосередньо інактивують вільні радикали й перешкоджають їхньому утворенню, беруть участь у відновленні природних антиоксидантів тощо, та, по-друге, препарати, що мають опосередковану антиоксидантну активність [2, 10]. Відсутність обґрунтованого строго дозованого застосування антиоксидантних засобів в практичній спортівній зумовлена низкою причин: недостатньою вивченістю цього питання, складністю адекватної оцінки стану параметрів ПОЛ та антиоксидантного захисту в організмі, малою кількіс-

тую ефективних і водночас безпечних медикаментозних засобів, що мають антиоксидантну активність і здатні швидко зменшити наслідки ОС [10, 11]. Тому пошук нових антиоксидантних засобів постійно триває, і для цього наразі все частіше застосовують сучасні технології, зокрема, віртуальний скринінг із використанням спеціальних комп'ютерних програм і баз даних стосовно різноманітних фармакологічних субстанцій [12].

Останнім часом клінічні та спортивні фармакологи все більшу увагу приділяють омега-3 поліненасичених жирних кислот (ПНЖК), які є незамінними для людини природними субстанціями [13], і препаратам на їх основі. Фармакологічні дослідження ПНЖК інтенсивно проводяться в усьому світі, однак молекулярні механізми розвитку їхніх терапевтичних ефектів остаточно не встановлено, а у спорті такі дослідження, на жаль, практично відсутні.

Основні представники сімейства омега-3 ПНЖК – це ейкозапентаєнова кислота (ЕПК) і докозагексаєнова кислота (ДГК). Як відомо, головна роль омега-3 жирних кислот полягає в забезпеченні функціонування клітинних мембран, трансмембранних іонних каналів і регуляції фізіологічних процесів шляхом синтезу ліпідних медіаторів. ЕПК і ДГК вбудовуються у фосфоліпідний шар клітинних мембран і впливають на їхню плинність, змінюючи основні мембранні функції, а саме ферментативну активність, передачу імпульсів і роботу рецепторів [14, 15].

ПНЖК – один з найважливіших структурних і функціональних елементів клітинної мембрани, що входять до складу фосфоліпідів і ефірів холестеролу, які створюють основу ліпідного матриксу мембран. ПНЖК є початковою субстанцією для синтезу ейкозаноїдів – простагландинів, тромбоксанів, лейкотрієнів та інших біологічно активних речовин, що покращують тонус судин, стан мікроциркуляції, агрегацію тромбоцитів, хемотаксис і міграцію нейтрофільних гранулоцитів, синтез цитокінів тощо. За сукупністю структурних і функціональних особливостей ПНЖК об'єднують в 3 сімейства: омега-3, омега-6, омега-9 [13, 14].

Омега-3 ПНЖК у зв'язку зі здатністю зменшувати вміст в крові холестеролу, триацилгліцеролів, ліпопротеїдів низької

і дуже низької щільності чинять виразну антиатерогенну дію [15]. Крім впливу на агрегаційну активність тромбоцитів, омега-3 ПНЖК впливають й на інші ланки системи гемостазу (зменшення змісту фібриногену, активація системи фібринолізу) [16]. Більшість з фармакологічних засобів (МахЕРА, Нью-Лайф, Ейконол), що випускаються за кордоном, містять не більше 30 омега-3 ПНЖК. Розроблений українськими вченими препарат Епадол (спочатку Теком) перевершує зарубіжні аналоги за кількісним вмістом омега-3 ПНЖК (не менше 43) та якісним складом (містить значно менше кислот сімейства омега-6) [17].

Виходячи з вищевикладеного стає ясным, що застосування антиоксидантів на основі омега-3 поліненасичених жирних кислот, є актуальним для спортивної фармакології. Проте тонкі механізми комплексного ефекту препаратів на основі ПНЖК з позиції сучасного рівня розвитку науки вивчені недостатньо, оскільки дослідження свого часу проводилися без застосування сучасних високоінформативних новітніх технологій. Тому обґрунтування та апробація методів та засобів, що дозволяють забезпечити підтримку високого рівня працездатності та збереження здоров'я спортсменів в умовах напруженої м'язової діяльності, є актуальною медико-біологічною та соціальною проблемою сучасного спорту України.

Одними з дуже ефективних у плані прогнозування у фармакологічних субстанцій біологічних властивостей, навіть тих, що раніше не були описані, є нові комп'ютерні технології. Для прогнозування властивостей нових фармакологічних засобів, в тому ергогенних, в теперішній час широко застосовують методи квантової фармакології, зокрема, такі ліганд-орієнтовані методи, як метод кількісного співвідношення структура-активність QSAR (*від англ.* Quantitative Structure – Activity Relationship) [12].

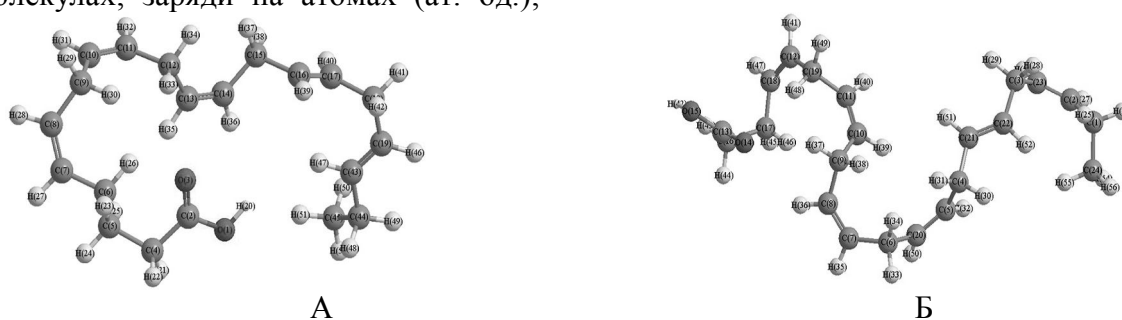
**Мета роботи** – шляхом застосування квантово-фармакологічних методів спрогнозувати біологічні властивості омега-3 ПНЖК для обґрунтування подальшого впровадження препаратів на їх основі в практику спортивної фармакології.

**Методи та організація досліджень.** З метою прогнозування біологічних ефектів, а саме для попередньої оцінки ная-

вності антиоксидантних властивостей основних представників омега-3-ПНЖК ЕПК і ДГК, що входять до складу фармакологічних засобів на їхній основі, зокрема, вітчизняного препарату Епадол (Теком), було використано метод QSAR-аналізу (дослідження виконано на каф. фармакології та клінічної фармакології Національного медичного університету ім. О.О. Богомольця під керівництвом члена-кореспондента НАН і АМН України доктора медичних наук І.С. Чекмана). Розраховано наступні квантово-хімічні показники: загальні розміри молекул (Å), відстані між атомами (Å); розміри кутів між зв'язками (°); розподіл електростатичного потенціалу в молекулах; заряди на атомах (ат. од.);

енергії та локалізація вищої зайнятої (ВЗМО) і нижчої вакантної (НВМО) молекулярних орбіталей (eV) Результати досліджень щодо структурних взаємодій між окремими атомами в молекулах наведено у рисунках і таблицях.

На рисунку 1 А представлено структуру молекули ЕПК з позначенням типів атомів та їхніх номерів, прийнятих при розрахунках. Згідно з результатами досліджень розміри молекули ЕПК за осями координат складають: X – 6,53 Å; Y – 4,76°Å; Z – 10,64°Å відповідно. На рис. 1 Б аналогічно представлено структуру молекули ДГК, розміри якої за осями координат складають: X – 6,84 Å; Y – 3,55°Å; Z – 13,23°Å..



**Рис. 1 Структура молекул ейкозапентаєнової (А) та докозагексаєнової (Б) кислот з позначенням типів атомів та їх номерів, прийнятих при розрахунках**

Відстані між атомами та розміри кутів між зв'язками належать до найважливіших топологічних дескрипторів фармакологічної активності. результати визначення цих параметрів у молекулах ЕПК і ДГК наведені в таблицях 1 і 2 відповідно. Можливість розрізнявати дуже близькі за будовою та складом сполуки робить топологічні індекси одними з

найбільш розповсюджених молекулярних дескрипторів в QSAR-аналізі. Статистично достовірні кореляції топологічних дескрипторів із певними видами фармакологічної активності знаходять застосування при спрямованому пошуку лікарських засобів навіть у тих випадках, коли логічне пояснення причин таких кореляцій відсутнє [12].

**Таблиця 1**

**Відстані між атомами в молекулі ЕПК**

R(1-1)	1,523	R(2-5)	1,100	R(4-4)	1,212
R(1-2)	1,497	R(2-6)	1,355	R(4-5)	1,090
R(1-3)	1,509	R(2-8)	1,377	R(4-7)	1,198
R(1-4)	1,470	R(2-9)	1,345	R(4-10)	1,158
R(1-5)	1,113	R(2-11)	1,320	R(5-15)	1,345
R(1-6)	1,402	R(2-12)	1,719	R(5-16)	1,346
R(1-8)	1,438	R(2-13)	1,881	R(5-17)	1,346
R(1-9)	1,450	R(2-14)	2,149	R(5-18)	1,346
R(1-11)	1,392	R(2-15)	1,815	R(5-19)	1,489
R(1-12)	1,795	R(2-19)	1,865	R(6-6)	1,428
R(1-13)	1,949	R(3-3)	1,334	R(6-19)	1,626
R(1-14)	2,149	R(3-5)	1,113	R(7-17)	1,480
R(1-15)	1,815	R(3-6)	1,338	R(7-18)	1,450
R(1-16)	1,816	R(3-7)	1,208	R(7-43)	1,268
R(1-17)	1,805	R(3-9)	1,369	R(8-8)	1,381
R(1-18)	1,784	R(3-11)	1,392	R(15-15)	2,024
R(1-19)	1,880	R(3-12)	1,795	R(15-44)	1,345
R(1-43)	1,488	R(3-13)	1,949	R(19-19)	2,332
R(2-2)	1,337	R(3-14)	2,149	R(37-43)	1,257
R(2-3)	1,351	R(3-15)	1,815	R(37-45)	1,255
R(2-4)	1,313				

Примітка: R(1-2)\* відстань між атомами (Å), номери яких указано в дужках відповідно до рис 1 А

Для ЕПК і ДГК – представників омега-3 ПНЖК – механізми розвитку фармакологічної активності остаточно не з'ясовано, тому детальний опис параметрів форми молекул є важливим при встановленні молекулярних мішеней даних сполук. Міжмолекулярні взаємодії ПНЖК в організмі людини можуть бути описані різними якісними показниками: зарядами на атомах, потенціалами іонізації, тобто енергією ВЗМО, спорідненістю до електрона, тобто енергією НВМО, індексами реакційної здатності

тощо. Електрони та ядра атомів і молекул – це заряджені частинки, що створюють електричний потенціал в оточуючому просторі. Електростатичний потенціал є реальною фізичною величиною, яку може бути визначено експериментально методами дифракції або розраховано за допомогою квантово-хімічних програм. Значення електростатичного потенціалу в кожній точці простору залежить від домінуючого впливу атомних ядер чи електронів у цій точці.

**Таблиця 2**

**Відстані між атомами в молекулі ДГК**

R(1-1)	1,523	R(2-8)	1,377	R(4-10)	1,158
R(1-2)	1,497	R(2-9)	1,345	R(5-15)	1,345
R(1-3)	1,509	R(2-11)	1,320	R(5-16)	1,346
R(1-4)	1,470	R(2-12)	1,719	R(5-17)	1,346
R(1-5)	1,113	R(2-13)	1,881	R(5-18)	1,346
R(1-6)	1,402	R(2-14)	2,149	R(5-19)	1,489
R(1-8)	1,438	R(2-15)	1,815	R(5-22)	1,086
R(1-9)	1,450	R(2-19)	1,865	R(5-25)	1,437
R(1-11)	1,392	R(2-22)	1,467	R(6-6)	1,428
R(1-12)	1,795	R(3-3)	1,334	R(6-19)	1,626
R(1-13)	1,949	R(3-5)	1,113	R(6-20)	0,600
R(1-14)	2,149	R(3-6)	1,338	R(6-21)	0,942
R(1-15)	1,815	R(3-7)	1,208	R(6-24)	0,972
R(1-16)	1,816	R(3-9)	1,369	R(7-17)	1,480
R(1-17)	1,805	R(3-11)	1,392	R(7-18)	1,450
R(1-18)	1,784	R(3-12)	1,795	R(8-8)	1,381
R(1-19)	1,880	R(3-13)	1,949	R(8-20)	0,600
R(1-22)	1,505	R(3-14)	2,149	R(8-22)	1,438
R(2-2)	1,337	R(3-15)	1,815	R(8-23)	1,020
R(2-3)	1,351	R(3-22)	1,447	R(9-22)	1,438
R(2-4)	1,313	R(4-4)	1,212	R(19-22)	1,860
R(2-5)	1,100	R(4-5)	1,090	R(22-22)	1,500
R(2-6)	1,355	R(4-7)	1,198		

Примітка: R(1-6)\* відстань між атомами (Å), номери яких указано в дужках відповідно до рис.1 Б

Для нейтральних сферичних атомів, електростатичний потенціал є позитивним та поступово зменшується зі збільшенням відстані від ядра. При поєднанні атомів у молекули відбувається їхня поляризація та утворення ділянок із негативним потенціалом. Зазвичай, негативний електростатичний потенціал мають атоми з неподіленими електронними парами (такі як F, N, O, Cl, Br) та ділянки з ненасиченими вуглецевими зв'язками [12]. Встановлення ділянок молекули, що мають негативний електростатичний потенціал, є важливим етапом для прогнозування взаємодії молекули з електрофілами.

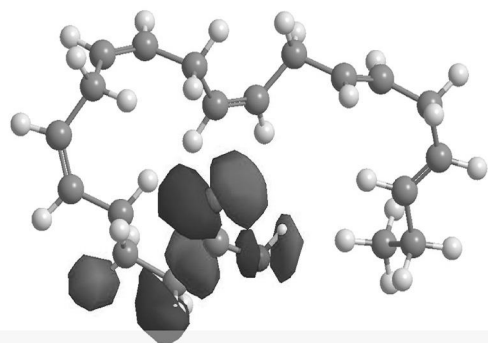
Однак аналіз електростатичного потенціалу молекул дозволяє вирішувати й більш складні завдання. Зокрема, усі сучасні комп'ютерні програми для моделювання процесів взаємодії ферментів із субстратами та рецепторів із лігандами

розраховують розподіл молекулярного електростатичного потенціалу як інтегральну величину, що характеризує реакційну активність молекул.

Найбільш негативні заряди в молекулі ейкозапентаєнової кислоти спостерігаються на атомах O1 (-0,48 ат. од.), O3 (-0,47 ат. од.) та C45 (-0,32 ат. од.). Найбільша електронна густина (густина ймовірності знаходження електрона в даній точці простору) характерна для атомів O1 (290,05 ат. од.) та O3 (290,35 ат. од.). Найбільш негативний електростатичний потенціал мають атоми O1 (-22,27 ат. од.) та O3 (-22,33 ат. од.). У молекулі докозагексаєнової кислоти найбільш негативні заряди встановлені на атомах O14 (-0,45 ат. од.), O15 (-0,47 ат. од.), C24 (-0,31 ат. од.).

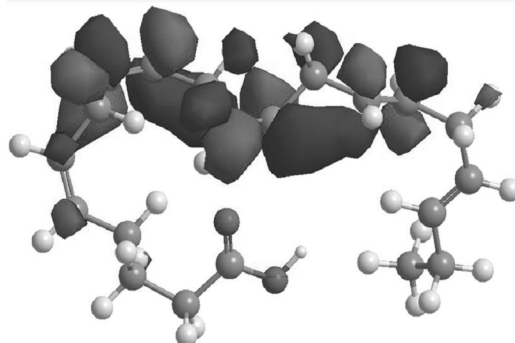
На рисунках 2, 3 показана локалізація граничних орбіталей у молекулах ЕПК і ДГК. Вищезайнята молекулярна орбіталь

характеризує взаємодію молекули з електроноакцепторами, а нижча вакантна молекулярна орбіталь – з електронодо-



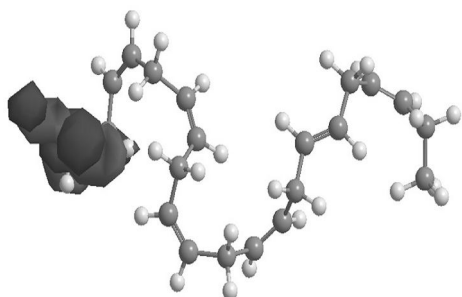
А

норами; при цьому позитивна енергія НВМО визначає нуклеофільні властивості молекули, негативна – електрофільні.

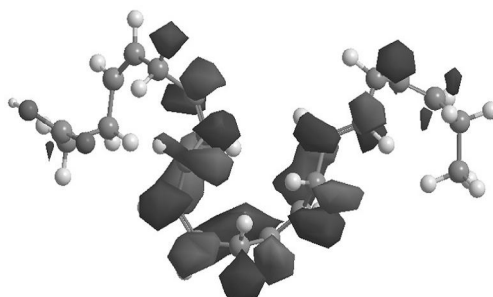


Б

**Рис. 2 Локалізація ВЗМО (А) та НВМО (Б) у молекулі ейкозапентаєнової кислоти**



А



Б

**Рис. 3 Локалізація ВЗМО (А) та НВМО (Б) у молекулі докозагексаєнової кислоти**

Відповідно до теореми Купменса, енергії граничних орбіталей із протилежними знаками відповідають значенням потенціалу іонізації молекули ІА (енергія ВЗМО) або її спорідненості до електрону АА (енергія НВМО) [12, 18]. Значення енергій граничних орбіталей є найважливішим дескриптором антиоксидантної активності [18, 19]. Установлено, що редокс-потенціал антиоксидантів фенольної природи збільшується зі збільшенням негативної енергії НВМО, антиоксидантна активність похідних вітаміну Е підвищується при зменшенні негативної енергії ВЗМО [11]. Дані квантово-хімічного аналізу свідчать, що за структурою ПНЖК більше подібні до антиоксидантів токоферолової структури – похідних каротину (каротиноїдів). Антиоксидантна активність каротиноїдів залежить від різниці енергій ВЗМО та НВМО (ЕВ-Н), а також потенціалу іонізації. При зменшенні значення ЕВ-Н і потенціалу іонізації антиоксидантна активність каротиноїдів зростає [20].

У молекулі ЕПК нараховується 111 молекулярних орбіталей. ВЗМО (№ 61) локалізується на карбоксильній групі та має енергію -12,82 еВ. НВМО (№ 62) займає атоми вуглецю в центрі молекули та має енергію -0,34 еВ. У молекулі ДГК

нараховується 116 молекулярних орбіталей. ВЗМО (№ 66) має енергію -12,71 еВ, НВМО (№ 67) – -0,24 еВ. Локалізація граничних орбіталей в ДГК подібна до ЕПК. Цікаво, що в молекулах антиоксидантів групи каротиноїдів локалізація НВМО, як і в молекулах ПНЖК, відбувається також на ділянці вуглецевого ланцюга з ненасиченими зв'язками [21], що дає змогу припустити подібний характер антиоксидантної дії ПНЖК.

**Висновки.** Таким чином, на основі результатів проведеного квантово-фармакологічного прогнозування за методом QSAR зі значною долею вірогідності можна припустити, що кількість і взаємне розташування ненасичених зв'язків у молекулах ПНЖК визначають антиоксидантні та, відповідно, опосередковані ергогенні властивості даних сполук, що є дуже корисним при застосуванні у практиці підготовки спортсменів. Включення до програм фармакологічного забезпечення лікарських засобів на основі ПНЖК, як свідчать дані сучасних досліджень, знижує ризик коронарних захворювань та раптової коронарної смерті, особливо в юних спортсменів [22] та, поліпшуючи структурно-функціональний стан мембран, сприяє

покращенню механізмів енергозабезпечення.

**Перспективи подальших досліджень.** Наступним етапом повинне стати вивчення *in vivo* у спортсменів-добровольців впливу препаратів на основі ПНЖК, зокрема вітчизняного Епадолу та подібних фармакологічних засобів, на показники окисного гомеостазу, структурно-функціональний стан клітинних мембран і показники фізичної працездатності та стану серцево-судинної системи для того, щоб оцінити механізми реалізації ергогенної дії та обґрунтувати ефективність застосування фармакологічних засобів на основі ПНЖК для стимуляції фізичної працездатності з метою подальшого їх впровадження в практику спортивної підготовки.

Роботу виконано за підтримки гранту 2.24 Міністерства освіти і науки, молоді та спорту України в галузі фізичного виховання і спорту.

#### **ЛІТЕРАТУРА**

1. Платонов В.Н. Допинг и проблемы фармакологического обеспечения подготовки спортсменов / В.Н. Платонов, С.А. Олейник, Л.М. Гунина. – Москва: Советский спорт, 2010. – 306 с.
2. Горчакова Н.А. Фармакология спорта. Под общей ред. Олейника С.А., Гуниной Л.М., Сейфуллы Р.Д. / Н.А. Горчакова, Я.С. Гудивок, Л.М. Гунина [и соавт.]. – Киев: Олимпийская литература, 2009. – 615 с.
3. Miller E. Effect of short-term cryostimulation on antioxidative status and its clinical applications in humans / E. Miller, L. Markiewicz, J. Saluk, I. Majsterek // Eur. J. Appl. Physiol. – 2011. – V. 46, № 6. – P. 128–135.
4. Макарова Г.А. Фармакологическое обеспечение в системе подготовки спортсменов / Г.А. Макарова. – Москва: Советский спорт, 2003. – 160 с.
5. Rowlands D.S. Oxidative stress, inflammation, and muscle soreness in an 894-km relay trail run / D.S. Rowlands, E. Pearce, A. Aboud [et al.] // Eur. J. Appl. Physiol. – 2011. – V. 46, № 11. – P. 245–452.
6. Гунина Л.М. Влияние сукцинату натрия на эритроциты за окисного стрессу при интенсивных физических навантаженнях / Л.М. Гунина // Физиол. журнал. – 2011. – Т. 5-6, № 6. – С. 71–79.
7. Statsenko E.A. Characteristics of lipid peroxidation and markers of endogenous intoxication in monitoring physical loads during rower training / E.A. Statsenko // Vopr. Kurortol. Fizioter. Lech. Fiz. Kult. – 2011. – № 3. – P. 41–45.

8. Deminice R. Oxidative stress biomarker responses to an acute session of hypertrophy-resistance traditional interval training and circuit training. / R. Deminice, T. Sicchieri, M.S. Mialich [et al.] // J. Strength Cond. Res. – 2011. – V. 25, № 3. – P. 798–804.
9. Kamandulis S. Monitoring markers of muscle damage during a 3 week periodized drop-jump exercise programme / S. Kamandulis, A. Skurvydas, A. Sniekus [et al.] // J. Sports Sci. – 2011. – V. 29, № 4. – P. 345–353.
10. Chaudiere J. Intracellular antioxidants: from chemical to biochemical mechanisms / J. Chaudiere, R. Ferrari-Illiou // Food Chem. Toxicol. – 1999. – V. 37, № 9–10. – P. 949–962.
11. Kleinova M. Antioxidant properties of carotenoids: QSAR prediction of their redox potentials / M. Kleinova, M. Hewitt, V. Brezova [et al.] // Gen. Physiol. Biophys. – 2007. – V. 26, № 2. – P. 97–103.
12. Чекман І.С. Методи комп'ютерних розрахунків у квантовій фармакології / І.С. Чекман, О.О. Казакова, Т.Ю. Небесна // Фармакологія та лікарська токсикологія. – 2008. – № 1. – С. 48–56.
13. Ney J.G. Associations of n-6 and n-3 polyunsaturated fatty acids and tocopherols with proxies of membrane stability and subcutaneous fat sites in male elite swimmers / J.G. Ney, J.C. Koury, V.B. Azeredo [et al.] // Nutr. Res. – 2009. – V. 29, № 9. – P. 623–630.
14. Borren van, M.M. Dietary Omega-3 Polyunsaturated Fatty Acids Suppress NHE-1 Upregulation in a Rabbit Model of Volume- and Pressure-Overload // M.M. van Borren, H.M. den Ruijter, A. Baartscheer [et al.] // Front. Physiol. – 2012. – V. 3. – P. 76–81.
15. Harris W.S. Fish oils and plasma lipid and lipoprotein metabolism in humans / W.S. Harris // J. Lipid. Res. – 2009. – V. 40. – P. 785–807.
16. Пыж М.В. Влияние диеты, обогащенной омега-3 полиненасыщенными жирными кислотами, на показатели фибринолитической системы крови у больных на начальных стадиях ишемической болезни сердца / М.В. Пыж, Н.А. Грацианский, А.Б. Добровольский // Кардиология. – 2003. – № 6. – С. 21–25.
17. Омега-3 ПНЖК. Новый лекарственный препарат Теком / Под ред. Ю.И. Фещенко и В.К. Гаврисюка. – Киев, 1996. – 124 с.
18. Sun Y-J. Quantitative Structure-activity Relationship Study on the Antioxidant Activity of Carotenoids / Y-J. Sun, J. Pang, X-Q. Ye [et al.] // Chinese J. Struct. Chem. – 2009. – V. 28, № 2. – P. 2163–2170.
19. Nicolle E. QSAR analysis and molecular modeling of ABCG2-specific inhibitors / E. Nicolle, A. Boumendjel, S. Macalou // Adv. Drug Delivery Reviews. – 2009. – V. 61. – P. 34–46.
20. Wall R. Fatty acids from fish: the anti-inflammatory potential of long-chain omega-3 fatty acids / R. Wall, R.P. Ross, G.F. Fitzgerald [et al.] // Nutr. Rev. – 2010. – V. 68, № 5. – P. 280–289.
21. Lien E.J. Quantitative structure-activity relationship analysis of phenolic antioxidants / E.J. Lien, S. Ren, H.H. Bui [et al.] // Free Radic. Biol. Med. – 1999. – V. 26, № 3–4. – P. 285–294.
22. Ramel A. Cardiovascular risk factors in young, overweight, and obese European adults and associations with physical activity and omega-3 index / A. Ramel, C. Pumberger, A.J. Martinéz [et al.] // Nutr. Res. – 2009. – V. 29, № 5. – P. 305–312.

#### **Гунина Л.М. ОЦЕНКА НА ОСНОВЕ КВАНТОВО-ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ПЕРСПЕКТИВ ПРИМЕНЕНИЯ ПОЛИНЕНАСЫЩЕННЫХ ЖИРНЫХ КИСЛОТ ДЛЯ СТИМУЛЯЦИИ ФИЗИЧЕСКОЙ РАБОТОСПОСОБНОСТИ**

**Резюме.** На основании результатов квантово-фармакологических исследований с анализом атомной структуры молекулы показано, что основные представители семьи полиненасыщенных омега-3-жирных кислот – эйкозапентаеновая и докозагексаеновая – обладают выраженными антиоксидантными и мембранопротективными свойствами, сходными с биоантиоксидантами каротиноидами. Обсуждается возможность и целесообразность применения отечественного препарата на основе полиненасыщенных жирных кислот Эпадол в практике подготовки спортсменов для стимуляции физической работоспособности.

**Ключевые слова:** квантово-фармакологический анализ, полиненасыщенные жирные кислоты, антиоксиданты, мембранопротекторы, физическая работоспособность

#### **Gunina L.M. ESTIMATION ON BASIS OF QUANTUM&PHARMACOLOGICAL ANALYSIS OF APPLICATION'S PROSPECTS OF POLYUNSATURATED FATTY ACIDS FOR PHYSICAL CAPACITY'S STIMULATION**

**Summary.** On the basis of results of quantum-pharmacological researches with the analysis of atomic structure of molecule is showed, that basic representatives of family of polyunsaturated omega-3-fatty acids – eicosapentaenoic and docosahexaenoic – possess the expressed antioxidant and membranoprotective properties similar with bioantioxidants carotenoids. Possibility and expediency of application of Ukrainian medical drug Epadol on the basis of polyunsaturated fatty acids in practice of preparation of sportsmen for stimulation of physical capacity come into question.

**Keywords:** quantum-pharmacological analysis, polyunsaturated fatty acids, antioxidants, membranoprotectors, physical capacity

**Рецензет: проф. Орлова О.А.**