

ФАРМАКО-ТОКСИКОЛОГИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА РЯДА ПРОИЗВОДНЫХ ГАЛЛОВОЙ КИСЛОТЫ *INSILICO*

Коробач Е.В.

Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, Беларусь
Научные руководители – зав.сектором биохимической токсикологии и наркологии ИББАС НАНБ Шляхтун А. Г.; д. б. н., доц., зам. директора по научной работе ИББАС НАНБ Пронько П. С.

Галловая кислота (ГК) и ее производные широко используются, прежде всего, как консерванты в производстве продуктов питания и компоненты косметических средств, между тем, в доступной литературе отсутствуют данные о токсичности и фармакологических свойствах ГК и ее производных.

Целью исследования стала фармако-токсикологическая оценка ГК и ее производных эфирного ряда (C1-C6) *in silico*.

Материалы и методы. Для проведения фармако-токсикологической оценки субстанций использовались программные комплексы PASS, GUSAR и SOMP [1]. Определяемыми величинами стали дозы LD50 анализируемых соединений для крыс при различных путях поступления веществ в организм, вероятности наличия биологической активности соединений (Pa), вероятность осуществления метаболизма при участии соответствующих ферментов детоксикации (ΔP).

Результаты. По данным PASS и GUSAR, анализируемые соединения имеют высокие значения LD50 и относятся к 4 и 5 классам токсичности и являются малотоксичными веществами. Показано, что все исследованные соединения с высокой степенью вероятности (Pa=0,64-0,90) обладают способностью ингибировать свободнорадикальные процессы. По данным прогноза (Pa=0,50-0,85) все они обладают противовоспалительным и антиканцерогенным действием. Установлены вероятные пути детоксикации ГК и задействованные ферменты семейств цитохромов P450, Г-S-T, УДФ-глюкурозилтрансфераз и других. Нами показано, что с наибольшей вероятностью метаболизм производных ГК опосредуется CYP1A2 (ΔP=0,876), CYP2D6 (ΔP=0,862), CYP3A4 (ΔP=0,854).

Выводы. Полученные *in silico* результаты прогноза биологической активности и токсичности производных ГК коррелируют с известными данными, существенно дополняют и раскрывают возможности использования указанных соединений. Полученные данные могут стать основой для использования ГК в качестве нетоксичных регуляторов метаболизма у животных и человека.

Литература

1. QSAR modelling of rat acute toxicity on the basis of PASS prediction / A. Lagunin [et al.] // Molecular Informatics. – 2011. – Vol. 30. – P. 241–250.