

**В. П. Осипова¹, М. А. Половинкина², А. Д. Осипова²,
О. В. Федотова³, Н. Т. Берберова²**

¹Южный научный центр РАН,
344006, Россия, г. Ростов-на-Дону, пр. Чехова, 41,
osipova_vp@mail.ru,

²Астраханский государственный технический университет,
414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 16,
polovinkina.ast@gmail.com,

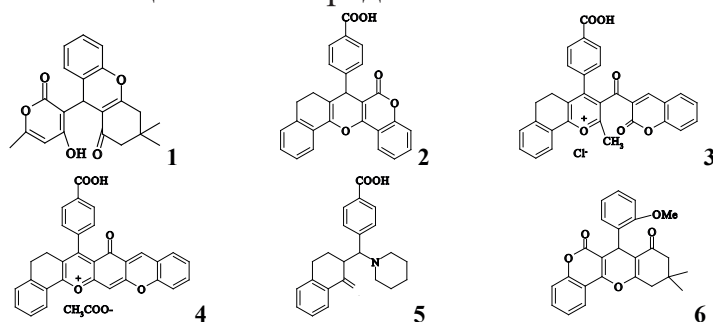
³Саратовский национальный исследовательский
государственный университет им. Н. Г. Чернышевского,
410012, Россия, г. Саратов, ул. Астраханская, 83,
Fedotova_ov@rambler.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИОКСИДАНТНЫХ СВОЙСТВ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2Н-ПИРАН(ХРОМЕН)-2-ОНОВ*

Ключевые слова: производные 2Н-пиран(хромен)-2-онов, антирадикальная активность, ДФПГ, адреналин, супероксид анион-радикал.

Представители 2Н-пиран(хромен)-2-онового ряда обладают обширным спектром биологической активности, включая антиоксидантную, что открывает перспективы изучения их свойств и проведения поиска наиболее эффективных соединений, которые могут найти практическое применение в качестве потенциальных ингибиторов окислительного стресса и воспалительных процессов. В качестве терапевтических препаратов или в сочетании с ними используется много антиоксидантов, однако не все из них достаточно эффективны, для некоторых обнаружено проявление нежелательных побочных эффектов. В связи с этим поиск новых представителей данного класса соединений остаётся актуальной проблемой.

С помощью компьютерной программы PASS [1] рассчитана потенциальная антиоксидантная активность производных 2Н-пиран-(хромен)-2-онов (1–6), в ДФПГ- и CUPRAC-тестах оценена антирадикальная активность.



Рассчитаны вероятности наличия (P_a) и отсутствия биологических активностей (P_i), значения которых являются независимыми и варьируются от 0 до 1. Из всех видов биологической активности выбраны только те, где соблюдается условие $P_a > P_i$. Согласно полученным расчётам, все соединения потенциально могут выступать антиоксидантами, ловушками активных радикалов и антидотами ($P_a = 0.138 \div 0.521$).

Таблица

Антиоксидантная активность соединений 1–6

Соединение	Прогноз активности, P_a					ДФПГ, %	TEAC _{CUPRAC}
	Антиоксидантная активность	Ловушка свободных радикалов	Ловушка кислорода	Ловушка оксида азота	Антидот		
1	0.285	0.521	—	0.148	—	5.88	0.22
2	0.234	0.369	0.296	—	0.267	16.86	0.23
3	0.244	0.413	—	—	0.246	4.85	0.34
4	0.288	0.391	—	—	0.229	5.76	0.34
5	0.149	—	0.285	—	0.197	5.36	0.29
6	0.265	0.333	—	0.138	—	–7.58	0.13

Реакция со стабильным 1,1-дифенил-2-пикрилгидразильным радикалом (ДФПГ-тест) позволяет выявить антирадикальную активность соединений. Установлено, что все соединения, кроме **6**, могут проявлять невысокую активность, процент ингибирования $5.36 \div 16.86$. Оценка возможности соединений **1–6** выступать в качестве доноров электрона в CUPRAC-тесте – методе, основанном на способности соединения восстанавливать Cu^{2+} в комплексе с 2,9-диметил-1,10-фенантролином, – показывает антиоксидантную активность в 5 раз ниже активности тролокса – водорастворимого аналога токоферола (TEAC_{CUPRAC}).

Таким образом, полученные экспериментальные данные ДФПГ- и CUPRAC-тестов подтверждают прогноз *in silico* о потенциально невысокой антирадикальной активности новых производных 2H-пиран-(хромен-)-2-онов, однако необходимы дополнительные исследования по установлению антиоксидантных свойств.

Список литературы

1. Poroikov V., Filimonov D. A., Ihlenfeldt W. D. et al. // J. Chem. Inf. Comput. Sci. 2015. Vol. 43. P. 228.

* Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 20-03-00446.