

Изучение взаимосвязи «структура – токсичность» в ряду бензимидазол- и бензотриазолсодержащих соединений

© Васин^{1*} Антон Евгеньевич, Белоусова²⁺ Зоя Петровна,
Селезнева¹ Екатерина Сергеевна, Зарубин² Юрий Павлович
и Пурыгин² Петр Петрович

¹ Кафедра зоологии, генетики и общей экологии. ² Кафедра органической, биоорганической и медицинской химии. Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева. ул. акад. Павлова, 1. г. Самара, 443011. Самарская область. Россия.
Тел.: (846) 334-54-59. E-mail: zbelousova@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 1*H*-бензимидазол-1-илметанол, 1-[(2-бензил-1*H*-бензимидазол-1)метил]-1*H*-бензотриазол, 1-бензил-1*H*-бензотриазол, 2-бензил-1-(3-фенилпропил)-1*H*-бензимидазол, токсичность, *Paramecium caudatum*.

Аннотация

Изучена токсичность следующих гетероциклических азолов: 1*H*-бензимидазол-1-илметанола (I), 1-[(2-бензил-1*H*-бензимидазол-1)метил]-1*H*-бензотриазола (II), 1-бензил-1*H*-бензотриазола (III), 2-бензил-1-(3-фенилпропил)-1*H*-бензимидазола (IV). Тест-объектом служили инфузории *Paramecium caudatum*. Исследовали токсичность I–IV в виде водных растворов в концентрациях 0.0001, 0.001, 0.01 и 0.1; 1 мг/мл. Время воздействия составило один и три часа. Токсичность оценивали по количеству погибших инфузорий после избранной экспозиции. Все исследованные соединения при часовой экспозиции в концентрации 0,0001 мг/мл не оказывали токсического действия на инфузории. В концентрации 0.1 мг/мл они вызвали 100% гибель исследованного тест-объекта. При других концентрациях при часовой экспозиции вещества не обнаруживали статистически значимых различий в токсичности. При трёхчасовом воздействии на исследуемый тест-объект обнаружено, что все соединения в концентрации 0.01 мг/мл вызывают 100% смертность, а при воздействии веществами в других проанализированных концентрациях наибольшую токсичность для инфузорий проявил III, наименьшую – II. Более длительное воздействие на *Paramecium caudatum* вызывает больший негативный биологический ответ. Согласно данным проведенного двухфакторного дисперсионного анализа, физико-химическими параметрами, определяющими токсичность соединений I–IV, являются величина дипольного момента, липофильность и молекулярный объем. Для их расчета были использованы программы Gaussian 98 и ALOGPS 2.1. Однако корреляций между токсичностью и указанными параметрами для соединений I–IV не обнаружено, что можно объяснить наличием в структурах молекул рассмотренных соединений фрагментов заместителей различного строения.