Тематический раздел: Исследование свойств веществ. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Биотехнология. *Идентификатор ссылки на объект* – ROI: jbc-01/23-73-2-75
Цифровой идентификатор объекта – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-73-2-75
Поступила в редакцию 23 января 2022 г. УДК 615.917 + 504.054.

Комплексная оценка токсичности некоторых структурноподобных полигидроксиазобензолов методами *in silico* и *in vitro*

© Мелешенкова[+] Валентина Владимировна, Солнышкина Мария Яковлевна, Переплетчиков Константин Олегович, Кузнецов* Дмитрий Николаевич, Кобраков Константин Иванович

Кафедра органической химии. Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство). ул. Садовническая, д.33, стр.1. г. Москва, 117997. Россия. Тел.: +7 (495) 811-01-01. E-mail: meleshenkova-vv@rguk.ru

*Ведущий направление; [+]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полигидроксиазобензолы, 2-метил-1,3-дигидроксибензол, 2-нитро-1,3-дигидроксибензол, резорцин, флороглюцин, 2,4,6-тригидрокситолуол, 2,4,6-тригидроксинитробензол, азосоединения, токсичность, QSAR, *Allium cepa*, *Allium test*.

Аннотация

В течение длительного времени для проверки безопасности органических соединений использовались эксперименты на животных, однако, в последние годы такие тестирования сведены к минимуму. В связи с этим все более популярными становятся экспериментальные токсикологические исследования в условиях *in vitro* с использованием биологических тест-объектов (культур клеток, микроорганизмов, простейших и др.), а также доэкспериментальные компьютерные методы *in silico*, основанные на анализе QSAR-зависимостей – количественных соотношений «структура – активность», которые, как правило, позволяют в короткие сроки получить ценную информацию о биологическом действии веществ.

В статье обсуждаются результаты оценки токсичности азокрасителей с использованием комплексного подхода, сочетающего прогноз острой токсичности методом *in silico* с применением программного обеспечения GUSAR (Acute rat toxicity prediction) и экспериментальную оценку токсичности методами *in vitro*.

На первом этапе работы был осуществлён доэкспериментальный прогноз уровня острой токсич-ности серии полифункциональных азобензолов с помощью программного обеспечения GUSAR (Acute rat toxicity prediction). Проведенный компьютерный прогноз летальной токсичности, для крыс при четырех методах введения (внутрибрюшинный, внутривенный, пероральный, подкожный) показал их низкую токсичность и перспективность использования в технологиях колорирования текстильных материалов.

С целью подтверждения данного факта проведена экспериментальная оценка токсичности экспресс-методом в условиях *in vitro* на приборе экологического контроля «Биотокс-10М» с использованием в качестве тест-объектов препаратов лиофилизированных люминесцентных бактерий серии «Эколюм». Наличие токсического эффекта также оценивалось по отношению к клеткам меристемы растения *Allium cepa (Allium test)*.

Полученные результаты с уверенностью показывают, что применение комплексного подхода оценки токсичности водорастворимых азосоединений, сочетающего в себе, прогнозирование значений острой токсичности *in silico* с использованием программного обеспечения GUSAR (*Acute rat toxicity prediction*) и экспериментальных методов *in vitro* позволяет более точно оценить токсичность изучаемых объектов. Использованный в работе подход позволил отнести синтезированные азопроизводные к группе малотоксичных соединений, перспективных для использования в технологиях колорирования текстильных материалов.

Выходные данные для цитирования русскоязычной <u>печатной</u> версии статьи:
Мелешенкова В.В., Солнышкина М.Я., Переплетчиков К.О., Кузнецов Д.Н., Кобраков К.И. Комплексная оценка токсичности некоторых структурноподобных полигидроксиазобензолов методами *in silico* и *in vitro*. *Бутлеровские сообщения.* **2023**. Т.73. №2. С.75-82. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-73-2-75

Выходные данные для цитирования русскоязычной <u>электронной</u> версии статьи:
Мелешенкова В.В., Солнышкина М.Я., Переплетчиков К.О., Кузнецов Д.Н., Кобраков К.И. Комплексная оценка токсичности некоторых структурноподобных полигидроксиазобензолов методами *in silico* и *in vitro*. *Бутлеровские сообщения С.* **2023**. Vol.5. No.1. Id.8. DOI: 10.37952/ROI-jbc-RC/23-5-1-8.