

Применение QSAR для прогнозирования антиокислительной способности веществ

© Кошелев* Владимир Николаевич, Снастина⁺ Ольга Вячеславовна,
Хургунов Максим Анатольевич, Куричьева Виктория Андреевна

Кафедра органической химии и химии нефти. РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина. Ленинский пр-т, 65, корп. 1. г. Москва, 119991. Россия. Тел: +7 (499) 507-81-11. E-mail: primerova92@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: взаимосвязь структура-свойство, антиокислитель, фенолы, флавоноиды.

Аннотация

В данном обзоре представлены литературные данные о применении методов QSAR-анализа при разработке антиокислителей для различных систем. Окислительная деструкция играет важную роль как в биохимических процессах, за счет действия свободных радикалов и активных форм кислорода на клеточные мембраны, липиды, белки, так и в процессах старения различных органических материалов: эластомеров, полимеров, пластиков. Для того, чтобы удалить свободные радикалы и/или активные формы кислорода используют антиокислители. С целью анализа влияния структуры антиокислителей на их свойства многие группы исследователей используют методы QSAR-анализа. В обзоре дается общая информация о ходе построения моделей QSAR, видах дескрипторов, их выборе, фильтрации, методах построения моделей и их валидации. Основная часть обзора сосредоточена на ряде подходов, примененных разными группами исследователей при расчете и выборе информативных дескрипторов, методах построения моделей, их проверки и анализе стабильности, которые привели к созданию работоспособных QSAR-моделей, которые могут прогнозировать антиокислительные свойства фенолов и их производных, полифенолов, флавоноидов, а также некоторых аминов и трипептидов. Антиокислительная активность определялась исследователями с помощью ряда стандартных методов *in vitro*, используемых для оценки антиокислительных свойств в биологических системах: DPPH, ABTS, FERAC CUPRAC, в качестве референтных данных для прогнозирования чаще всего использовали значение полумаксимальной эффективной концентрации EC50. Кроме того, ряд работ, приводимых в обзоре посвящен прогнозированию свойств антиокислителей в смазочных маслах. Результаты исследований, обобщенные в данной статье, помогают понять механизм взаимодействия антиоксидантов с радикалами, а также могут помочь в разработке новых антиокислителей.

Содержание

1. Общие сведения о QSAR моделировании

1.1. Подбор молекулярных дескрипторов и построение модели

1.2. Валидация модели

2. Обзор QSAR-моделей антиокислительных свойств

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Кошелев В.Н., Снастина О.В., Хургунов М.А., Куричьева В.А. Применение QSAR для прогнозирования антиокислительной способности веществ. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.80. №12. С.1-12.

DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-12-1

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Кошелев В.Н., Снастина О.В., Хургунов М.А., Куричьева В.А. Применение QSAR для прогнозирования антиокислительной способности веществ. *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.9. №4. Id.16.

DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-12-1/ROI-jbc-RA/24-9-4-16

The output for citing the English online version of the article:

Vladimir N. Koshelev, Olga V. Snastina, Maksim A. Khurgunov, Viktoriya A. Kuricheva. Application of QSAR to predict the antioxidant activity of substances. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.9. No.4. Id.16.

DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-12-1/ROI-jbc-A/24-9-4-16