Никитина В.С., Яминева Э.З.
*Бакирский государственный университет
Уфа, Россия*

doi: 10.18411/lj2016-6-5-02

Модификация инулина сульфаминокислотой и прогнозирование биологической активности конъюгата

Растительные полисахариды обладают высокой биологической активностью и широко распространены в природе. Они представляют интерес как неспецифические транспортные макромолекулы, улучшающие доставку лекарственных веществ к биомини. Кроме того, в результате введения в молекулы полисахаридов функциональных групп или низкомолекулярных фрагментов приводит к созданию новых лекарственных веществ [1,2]. Поэтому работы по данному направлению являются актуальными. При обработке литературных данных оказалось, что большинство схем модификации структуры растительных полисахаридов разработано в настоящее время только для целлюлозы и декстрана. В фармацевтической промышленности особый интерес представляет полифруктозан – инулин в качестве заменителя сахара в терапии диабета. Синтоном для модификации молекулы инулина стал интересен, на наш взгляд, таурин. Таурин – это сульфокислота, которая образуется в результате метаболизма из аминокислоты цистеина [3]. Таурин участвует в обмене липидов, улучшает энергетические и обменные процессы. Его широко применяют как антидиабетическое средство благодаря воздействию на органы, обычно пораженные у диабетиков (почки, зрение, нервная система) и как средство, контролирующее уровень сахара в крови [3]. Синтез конъюгата инулина с таурином проводили по методике, описанной нами ранее [4].

Конъюгат инулина с таурином представляет собой аморфный порошок светло-желтого цвета, растворимый в воде, концентрированном этиловом спирте, но не растворимый в органических растворителях. Предполагается, что введение в структуру инулина низкомолекулярного терапевтического вещества приведет к тому, что биополимер приобретет новые свойства и возникнет возможность создания новой формы лекарственного препарата.

Прогноз биологической активности конъюгата инулина с таурином осуществляли с помощью компьютерной программы и базы данных PASS (Prediction of Activity Spectra of Substances) [5], которая позволяет прогнозировать основные фармакотерапевтические эффекты вещества, биохимические механизмы, на которых основаны эти действия и возможные побочные (токсические) влияния. Прогноз в программе осуществляется по структурной формуле химического соединения и основывается на анализе базы данных, которая включает в себя структурные формулы и данные об активностях известных биологически активных соединений.

По проведенным расчетам согласно программы PASS результат прогноза биологической активности конъюгата инулина с таурином можно наблюдать в следующей таблице.

Таблица 1

Результаты расчета прогнозируемой биологической активности конъюгата инулина с таурином по отношению к биологической активности инулина

Вид биологической активности	Значение вероятности наличия активности в		Вероятность наличия биологической активности в конъюгате инулина, %
	конъюгате инулина с таурином	инулине	
Стимулятор агрегации тромбоцитов	0.466	0.364	Усилено на 10,2%
Стимулятор лейкопоза	0.346	0.283	Усилено на 6,3%
Радиосенсибилизирующая	0.332	0.290	Усилено на 4,2%
Хемосенсибилизатор	0.372	0.339	Усилено на 3,3%
Лечение фобических расстройств	0.493	не проявляет	49,3

На основе результатов прогноза биологической активности конъюгата инулина с таурином, введение в структуру полисахарида низкомолекулярного фрагмента таурина положительно влияет на представленные в таблице виды

биологической активности, и способствует возникновению такой активности, как лечение фобических расстройств.

Литература:

1. Иозеп А.А., Бессонова Н.К., Пассет Б.В. Синтез сложных эфиров карбоксиэтилполисахаридов. // ЖПХ. 1998. – Т.71. - №6. – С.995-998.
2. Карасева А.Н., Миронов В.Ф., Цепяева О.В., Выштакалюк А. Б., Минзанова С.Г., Карлин В.В., Миндубаев А.З. Полиметаллокомплексы пектиновых полисахаридов и их биологическая активность. // Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщ. - 2004. - Т. 5, № 1. - С. 33-35.
3. Интернет-ресурс Энциклопедия лекарств и товаров аптечного ассортимента <http://www.rlsnet.ru>
4. Никитина В.С., Яминева Э.З. «Химическая модификация полифруктозана инулина органическими кислотами» - Тезисы докладов XVI Международной научно-технической конференции Приоритетные направления развития науки и технологии (г. Тула, 25 декабря 2014 г.), С.24-26.
5. Садым А.В., Лагунин А.А., Филимонов Д.А., Поройков В.В. Интернет-система прогноза спектра биологической активности химических соединений // Химико-технологический журнал. 2002. Т. 36. №10. С.21-26.