

Секція 2. БІОІНФОРМАТИКА

УДК 577.19.635.262

БРИДА О. Р.

Національний університет «Львівська політехніка», Україна, 79000, м. Львів вул. Степана Бандери, 12
e-mail: yuliakolb212@gmail.com, тел. +380938354820

ПРОГНОЗУВАННЯ LD_{50} БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН *ALLIUM SATIVUM*

Завдяки біоінформатиці з'явився більш гуманний метод визначення гострої токсичності на тваринах. Використовуючи комп'ютерну програму *GUSAR* дослідники з легкістю прогнозують LD_{50} обраних біологічно активних речовин, та використовують отримані данні для створення нових лікарських засобів.

Метою роботи є визначити гостру токсичну дію обраних біологічно активних речовин *Allium sativum* використовуючи комп'ютерну програму *GUSAR*.

Для проведення комп'ютерного аналізу обра- но такі речовини *Allium sativum*, як: Кемферол, Ліналоол, Флороглюцинол, Кверцетин, Рутин, Аллілцистеїн, Стигмастерол, Фолат. Для визна- чення гострої токсичної дії використано пакет комп'ютерної програми *GUSAR Acute Rat Toxicity*.

Завдяки доступності комп'ютерної програми *GUSAR* аналіз проведено online та отримано данні за чотирма видами введення (внутрішньо- брюшним, внутрішньовенним, підшкірним, ін- галяційним, пероральним). Отже отримано такі данні: 1.Кемферол: інтраперитонеальний шлях введення у щурів $LD_{50} = 1163$ мг/кг; внутріш- ньовенний шлях введення у щурів $LD_{50} = 392,6$ мг/кг; пероральний шлях введення у щурів $LD_{50} = 2183$ мг/кг; підшкірний шлях введення у щурів $LD_{50} = 5938$ мг/кг; 2.Ліналоол: інтрапери- тонеальний шлях введення у щурів $LD_{50} = 109,6$ мг/кг; внутрішньовенний шлях введення у щурів $LD_{50} = 81,03$ мг/кг; пероральний шлях введення у щурів $LD_{50} = 3271$ мг/кг; підшкірний шлях вве- дення у щурів $LD_{50} = 674,5$ мг/кг; 3.Флороглюци- нол: інтраперитонеальний шлях введення у щу- рів $LD_{50} = 994,4$ мг/кг; внутрішньовенний шлях

введення у щурів $LD_{50} = 145$ мг/кг; пероральний шлях введення у щурів $LD_{50} = 967,1$ мг/кг; під- шкірний шлях введення у щурів $LD_{50} = 1595$ мг/ кг; 4.Кверцетин: інтраперитонеальний шлях введення у щурів $LD_{50} = 698,5$ мг/кг; внутріш- ньовенний шлях введення у щурів $LD_{50} = 283,1$ мг/кг; пероральний шлях введення у щурів $LD_{50} = 675,3$ мг/кг; підшкірний шлях введення у щурів $LD_{50} = 1449$ мг/кг; 5. Рутин: інтрапери- тонеальний шлях введення у щурів $LD_{50} = 92,3$ мг/ кг; внутрішньовенний шлях введення у щурів $LD_{50} = 1520$ мг/кг; пероральний шлях введення у щурів $LD_{50} = 2793$ мг/кг; підшкірний шлях вве- дення у щурів $LD_{50} = 934,4$ мг/кг; 6.Аллілцисте- їн: інтраперитонеальний шлях введення у щу- рів $LD_{50} = 997,3$ мг/кг; внутрішньовенний шлях введення у щурів $LD_{50} = 1466$ мг/кг; пероральний шлях введення у щурів $LD_{50} = 2260$ мг/кг; під- шкірний шлях введення у щурів $LD_{50} = 1660$ мг/ кг; 7.Стигмастерол: інтраперитонеальний шлях введення у щурів $LD_{50} = 786,1$ мг/кг; внутрішньо- венний шлях введення у щурів $LD_{50} = 0,838$ мг/ кг; пероральний шлях введення у щурів $LD_{50} = 62,92$ мг/кг; підшкірний шлях введення у щу- рів $LD_{50} = 342,7$ мг/кг; 8.Фолат: інтраперитоне- альний шлях введення у щурів $LD_{50} = 1362$ мг/ кг; внутрішньовенний шлях введення у щурів $LD_{50} = 451,9$ мг/кг; пероральний шлях введення у щурів $LD_{50} = 3437$ мг/кг; підшкірний шлях вве- дення у щурів $LD_{50} = 1393$ мг/кг.

Таким чином, отриманні значення будуть ви- користовуватися для подальшого дослідження *Allium sativum*.

Ключові слова: Allium sativum, LD_{50} , біологічно активні речовини, GUSAR Acute Rat Toxicity.