

*Биологические науки***КОРРЕЛЯЦИИ ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ ПО ОТНОШЕНИЮ К ГРЫЗУНАМ ПРИ ОРАЛЬНОМ И ВНУТРИВЕННОМ СПОСОБЕ АДМИНИСТРИРОВАНИЯ**

Ярков А.В., Трепалин С.В., Раевский О.А.

*Институт физиологически активных веществ РАН, Черноголовка, e-mail: yarkov@ipac.ac.ru*

Установлены линейные корреляционные соотношения острой токсичности по отношению к крысам и мышам при внутривенном и оральном способе администрирования. Полученные уравнения позволяют восполнить отсутствующие экспериментальные значения токсичности путем их расчета при наличии данных по другим способам введения.

Одним из важнейших параметров, используемых при оценке возможности применения химического соединения в той или иной отрасли жизнедеятельности является его токсичность. Экспериментальная оценка токсичности химических соединений является дорогостоящей процедурой и сопровождается потерями большого числа животных. Решение этой проблемы можно значительно продвинуть используя современные методы компьютерного прогнозирования, таких как QSAR методы и различные межвидовые уравнения. Нами ранее [1] установлено наличие линейной корреляции между острой оральной токсичностью по отношению к мышам и к нескольким видам рыб (Guppy, Fathead Minnow, Rainbow Trout), инфузории Tetrahymena Pyriformis и рачку Daphnia Magna.

Острая летальная доза, при которой 50% животных погибает (LD50) является наиболее распространенной количественной мерой токсичности. Единицей измерения LD50 является количество молей вещества на килограмм живого веса (mol/kg). В данной работе использованы данные по острой токсичности по отношению к грызунам из коммерческой базы Symyx Toxicity [2]. После удаления данных, включающих соли, неорганические мо-

лекулы, металлоорганические соединения и комплексные соединения были получены массивы, содержащие данные по 21678 записей по оральной токсичности и 7346 записей по внутривенной токсичности. Среди этих массивов обнаружены структуры содержащие как значения по внутривенной так и по оральной токсичности, которые были использованы для построения корреляционных уравнений. Таких данных оказалось 1066 для мышей и 421 для крыс. В качестве количественной меры токсичности использовались величины  $\log(1/LD50)$ . При анализе данных были отброшены 6 соединений для массива мышей и 2 для крыс, рассчитанные значения для которых превышали значения трехкратного интервала SD.

Были получены следующие линейные уравнения, связывающие оральную и внутривенную токсичность.

Мыши:

$$\log(1/LD50)_{\text{oral}} = -0,65(0,02) + 0,75(0,02) * \log(1/LD50)_{\text{intravenous}}$$

$$N = 1060, R = 0,81, SD = 0,47$$

Крысы:

$$\log(1/LD50)_{\text{oral}} = -0,65(0,03) + 0,79(0,03) * \log(1/LD50)_{\text{intravenous}}$$

$$N = 419, R = 0,84, SD = 0,57$$

Где N – число соединений, R – коэффициент корреляции, SD – стандартное отклонение.

Статистические критерии уравнений являются удовлетворительными, а стандартные отклонения находятся на уровне определения экспериментальной токсичности. Таким образом, уравнения могут быть использованы для предсказания недостающих данных.

**Список литературы**

1. Раевский О.А., Раздольский А.Н., Липлавский Я.В., Раевская О.Е., Ярков А.В. Оценка острой токсичности органических соединений при внутривенном введении по отношению к мышам на основе межвидовых корреляций, параметров липофильности и физико-химических дескрипторов. Химико-фармацевтический журнал. – 2012. – Т. 46., №. 3. – С. 55–61.

2. Научный интернет ресурс DiscoveryGateR [www://discoverygate.com](http://www.discoverygate.com).

*Технические науки***АНАЛИЗ УСТАНОВКИ ЗАМЕДЛЕННОГО КОКСОВАНИЯ ТЯЖЕЛЫХ НЕФТЯНЫХ ОСТАТКОВ**

Трубникова А.Е., Леденев С.М.

*Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, e-mail: rtm115@yandex.ru*

Процесс замедленного коксования тяжелых нефтяных остатков является одним из важнейших и рентабельных процессов увеличения глубины нефтепереработки, обеспечивающий

получение (наряду с коксом) дополнительных дистиллятных продуктов.

Действующая однопоточная установка замедленного коксования типа 21-10/7 коксо-битумного производства ООО «ЛУЙКОЛ-Волгограднефтепереработка» мощностью 350 тыс тонн в год предназначена для получения из тяжелых остатков нефти кокса, используемого в алюминиевой промышленности и других отраслях народного хозяйства. В качестве исходного сырья на УЗК может использоваться гудрон установок