

INHIBICIJA KSANTIN-OXIDAZE I IN *SILICO* STUDIJA TRI N-(α -BROMACIL)- α -AMINO ESTRA

Žaklina Šmelcerović¹, Katarina Tomović², Denitsa Yancheva³,
Emiliya Cherneva⁴, Gordana Kocić⁵, Živomir Petronijević⁶

Univerzitet u Nišu, Medicinski fakultet, Naučnoistraživački centar za biomedicinu, Niš, Srbija¹

Univerzitet u Nišu, Medicinski fakultet, Katedra za farmaciju, Niš, Srbija²

Bugarska Akademija Nauka, Institut za organsku hemiju sa centrom za fitohemiju, Laboratorija za strukturnu organsku analizu, Sofija, Bugarska³

Medičinski Univerzitet u Sofiji, Farmaceutski fakultet, Departman za hemiju, Sofija, Bugarska⁴

Univerzitet u Nišu, Medicinski fakultet, Institut za biohemiju, Niš, Srbija⁵

Univerzitet u Nišu, Tehnološki fakultet, Leskovac, Srbija⁶

Kontakt: Žaklina Šmelcerović

Univerzitet u Nišu, Medicinski fakultet, Naučnoistraživački centar za biomedicinu

Bul. dr Zorana Đindjića 81, 18000, Niš, Srbija

E-mail: zsmelcerovic@yahoo.com

Tri aciklična N-(α -bromacil)- α -amino estra, metil-2-(2-brom-3-metilbutanamido)-pentanoat (**1**), metil-2-(2-brom-3-metilbutanamido)-2-fenilacetat (**2**) i metil-2-(2-brom-3-metilbutanamido)-3-fenilpropanoat (**3**) bila su podvrgnuta testu inhibicije komercijalne ksantin-oksidaze *in vitro* i ksantin-oksidaze u homogenatu jetre pacova. Ispitivana je-dinjenja nisu pokazala značajniji inhibitorni efekat niti na komercijalnom, niti na enzimu u homogenatu jetre pacova u ispitanoj koncentraciji (50 µg/ml). Potencijalni uzrok zabeleženog odsustva značajnije inhibicije ksantin-oksidaze može predstavljati aciklična struktura supstanci **1-3**, što je u saglasnosti sa datom pretpostavkom zadepsipeptide da je ciklična struktura neophodna za ispoljavanje biološke aktivnosti. Sa druge strane, povoljni farmakokinetički i toksikološki profili, predviđeni *in silico* studijom, mogu predstavljati dobar preduslov za potencijalno implementiranje ispitivanih estara u racionalne strategije i dizajn nosača u sintezi prolekova. *Acta Medica Medianae* 2016; 55(4): 14-20.

Ključne reči: N-(α -bromacil)- α -amino estri, *in silico* studija, inhibicija ksantin-oksidaze, prolek