

УДК 635.649+636.085.16+621.892.31+544.165

ИССЛЕДОВАНИЕ БИОХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА СЕМЯН И *IN SILICO* ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ КОМПОНЕНТОВ МАСЛА СЛАДКОГО ПЕРЦА

© Е.В. Щепетова*, Н.В. Золотарева

Астраханский государственный университет им. В.Н. Татищева,
пл. Шаумяна, 1, Астрахань, 414000, Россия, schepetova75@yandex.ru

В статье представлены результаты определения биохимического состава семян перца сладкого сорта «Подарок Молдовы», извлеченных из спелых плодов растений, выращенных на дачном участке в черте города Астрахани. Запасные питательные вещества семян представлены белками (24.6%), углеводами (4.8%), жирами (14.2%), клетчаткой (6.8%), содержание аскорбиновой кислоты в семенах – 2.6%, алкалоидов – 1.6%. Методом сверхкритической флюидной экстракции из семян перца сладкого сорта «Подарок Молдовы» получено масло с выходом 14%, жирнокислотный состав липидных фракций семян определен с помощью метода газожидкостной хроматографии после превращения жирных кислот в соответствующие метиловые эфиры. В составе масла – линолевая (71.65%), пальмитиновая (13.87%), олеиновая (9.26%), стеариновая (3%) кислоты. Обнаружены также элаидиновая (1.96%) и гексадециновая (0.26%) кислоты. Для идентифицированных компонентов масла семян провели оценку потенциальных видов фармакологической активности с помощью веб-ресурсов PASS-online и admetSAR. Все исследуемые компоненты показали слабо выраженные антибактериальные, противогрибковые и противовирусные свойства, некоторую активность в отношении штаммов вирусной инфекции Денге, передающейся человеку от комаров. Линолевая кислота проявляет активность в отношении грамположительного штамма *Staphylococcus simulans*. Пальмитиновая и стеариновая кислоты активны к малопатогенным стрептококковым бактериям *Streptococcus viridans*.

Ключевые слова: перец сладкий, семена, биохимический состав, масло, жирнокислотный состав, фармакологическая активность.

Для цитирования: Щепетова Е.В., Золотарева Н.В. Исследование биохимического состава семян и *in silico* определение фармакологической активности компонентов масла сладкого перца // Химия растительного сырья. 2025. №2. С. 207–214. <https://doi.org/10.14258/jcprm.20250215127>.

Введение

Современные исследования направлены на поиск технологий полного комплексного использования плодово-овощного сырья путем изучения энергетической, питательной и фармакологической ценности продуктов переработки плодов, представляющих собой отходы пищевой промышленности или вторичное сырье – семена, в которых сохраняется комплекс ценных биологически активных веществ, способных обогатить пищевую и фармацевтическую продукцию биологически активными добавками и незаменимыми компонентами (макро- и микронутриентами).

Перец сладкий (*Capsicum annuum* subsp. *Grossum*), подвид перца стручкового (*Capsicum annuum L.*) – овощная культура, плоды которой содержат углеводы (до 8.4%), белки (до 1.5%); витамины: С (до 500 мг%), β-каротин (до 3.8 мг%), Р, В₁, В₂, эфирное масло (1.5%), стероидные сапонины, алкалоид – капсаицин (до 0.7%, придает жгучий вкус плодам), макроэлементы – калий, фосфор, магний, кальций, натрий и др., количество которых варьирует в зависимости от условий произрастания и генотипа растения [1–3]. Плоды обладают высокой витаминной и питательной ценностью, лечебными свойствами, их используют для создания фармацевтических препаратов.

После переработки плодов остаются семена. Согласно литературным данным [4, 5], биохимический состав семян перца сладкого разных сортов представлен высоким содержанием белка (от 13.8 до 28.3%, в том числе незаменимыми аминокислотами – лизином, треонином, ароматическими аминокислотами и

* Автор, с которым следует вести переписку.

триптофаном), углеводами (3.2–3.4%), клетчаткой (до 46%), в составе липидных компонентов присутствуют свободные (до 9.2%) и связанные (до 86.9%) кислоты, токоферолы (до 22 мг%), каротиноиды (до 3.8 мг%), фосфолипиды (до 5.5%).

Семена перца сладкого не принято использовать в пищу, однако это доступное сырье может служить перспективным продуктом для пищевой, медицинской, фармацевтической и технической отраслей промышленности как источник белков, жиров, углеводов, клетчатки, незаменимых жирных кислот и ценных биологически активных веществ [6].

В.А. Попков с соавторами [5] методом хромато-масс-спектрометрии установили жирнокислотный состав масла семян сладкого перца нескольких сортов. Преобладающими высшими ненасыщенными жирными кислотами масла являются линолевая (до 69.6%), пальмитиновая (до 27.4%), олеиновая (до 19.5%), стеариновая (до 6.4%). В образцах масла также обнаружили миристиновую, 13-метилтетрадекановую, пентадекановую, 14-метилпентадекановую, пальмитолеиновую, 14-метилгексадекановую, маргариновую, арахиновую, линоленовую, бензеновую, трикозановую, лигноцериновую, пентакозановую, церотиновую кислоты, вклад которых составил от 0.05 до 1.0%.

В литературе представлены результаты фармакологических исследований жирных кислот разных растений. Изучена антиоксидантная активность сложных эфиров жирных кислот перца стручкового (*Capsicum annuum*) на основе измерения степени свободнорадикального окисления метиллиноволеата (методом ВЭЖХ измеряли образование гидропероксидов метиллиноволеата) [6]. Выявлена антимикробная активность олеиновой и линолевой кислот и найдены минимальные ингибирующие концентрации фракций жирных кислот (0.25–2 мг/мл) для двенадцати эталонных штаммов бактерий и дрожжей, которые показывают большую чувствительность бактерий к линолевой кислоте. Отмечен синергический антимикробный эффект олеиновой и линолевой кислот [7]. Обнаружена высокая способность липидных фракций улавливать радикал DPPH (2,2-дифенил-1-пикрилгидразил), что дает возможность рассматривать их в качестве антиоксидантов [8].

В настоящее время в медицинской химии активно применяют методы компьютерной оценки биологической активности и безопасности метаболитов растений, выявления молекулярных мишней, с которыми они могут взаимодействовать в организме человека. Данный подход формирует направление биологических, биотехнологических и фармакологических исследований и способствует созданию новых фармацевтических препаратов.

Экспериментальная часть

Объектом исследования явились семена перца сладкого сорта «Подарок Молдовы», извлеченные из спелых плодов, выращенных и собранных на дачном участке вдоль ерика Перекатного города Астрахани. Сбор сырья проводили в августе и первой половине сентября 2023 года, семена отделяли вручную, сушили воздушно-теневым методом.

Суммарное содержание белка в навеске семян рассчитывали, используя результаты спектрофотометрического определения концентрации белка в гомогенате из семян сладкого перца сорта «Подарок Молдовы» с фосфатным буфером [9].

Количественное содержание свободных аминокислот в семенах перца сладкого сорта «Подарок Молдовы» определяли спектрофотометрическим методом, используя реакцию взаимодействия аминокислот водного экстракта семян с раствором нингидрина [10].

Для количественного определения углеводов (восстановливающих и невосстановливающих сахаров и сахарозы) применили методику, в основе которой лежит реакция взаимодействия углеводов водного экстракта семян перца сладкого с раствором глицерата меди и спектрофотометрическое определение полученного раствора [9].

Количественное определение жира в семенах перца сладкого сорта «Подарок Молдовы» осуществляли хроматометрическим методом [10], используя способность раствора бихромата калия в серной кислоте при нагревании окислять углеводы и жиры семян до угольной кислоты и воды.

Для определения содержания клетчатки в семенах перца сладкого сорта «Подарок Молдовы» применили метод титрования раствора осажденной и очищенной клетчатки сырья солью Мора [10].

При определении аскорбиновой кислоты в семенах перца сладкого сорта «Подарок Молдовы» использовали метод йодометрического титрования [11], в основе которого лежит реакция окисления аскорбиновой кислоты экстракта семян перца сладкого йодом до дегидроаскорбиновой кислоты.

Сумму алкалоидов в семенах перца сладкого сорта «Подарок Молдовы» определяли методом титрования хлороформного извлечения семян, согласно методике [12, 13].

Из семян сладкого перца сорта «Подарок Молдовы» методом сверхкритической флюидной экстракции (экстрактор SFE-500 M1, фирмы THAR) получили образец растительного масла. Установили оптимальные условия экстракции, позволяющие увеличить выход масла: время экстракции – 40 мин, давление – 300 атм., температура – 40 °C, скорость потока диоксида углерода – 40 г/мин. Провели исследование жирнокислотного состава образца масла методом хромато-масс спектрометрии на приборе Agilent с библиотекой 40 тыс. химических соединений. Количественное содержание компонентов масла определили методом газожидкостной хроматографии на хроматографе Shimadzu GS 2010 с масс-селективным детектором после превращения жирных кислот в соответствующие метиловые эфиры при обработке диазометаном. Эфирный раствор диазометана получили из *N*-нитрозо-*N*-метилмочевины. Для идентификации использовали библиотеку масс-спектров NIST02. Хроматографирование осуществляли на колонке MIDN-1 (метилсиликон, твердосвязанный).

Образец дериватизированного масла растворяли в бензole в соотношении 1 : 150 по объему. Объем вводимой пробы составлял 1 мкл. Колонка неполярная ОРТИМА-1 (метилсиликон, твердосвязанный) 25 м, диаметр 0.25 мм. Режим хроматографирования: инжектор – 180 °C; детектор – 200 °C; интерфейс – 205 °C; газ носитель – гелий (99.99999%), 1 см³/мин при делении потока 1 : 25; термостат – 60 °C 1 мин, 2 °C/мин до 70 °C, 5 °C/мин до 190 °C, затем 30 °C/мин до 280 °C, изотерма 2 мин. Режим регистрации масс-спектров 39–550 m/z. Для определения линейных индексов дериватизат и нормальные парафины (C₉–C₂₂) растворяли в бензole. *n*-Парафины разбавляли до концентрации 0.007% по объему, масло – 1 : 30000 по объему. Количественное содержание жирных кислот вычислялось по площадям газохроматографических пиков без использования корректирующих коэффициентов. Количественный анализ проводили путем сравнения линейных индексов удерживания и полных масс-спектров компонентов с соответствующими данными чистых соединений. Линейные индексы удерживания рассчитывали по формуле, приведенной в работах [14].

Идентифицированные компоненты масла семян перца сладкого сорта «Подарок Молдовы» подвергли дальнейшим исследованиям на предмет оценки потенциальных видов фармакологической активности с помощью веб-ресурсов PASS-online [15, 16].

Обсуждение результатов

В результате проведенного исследования были выявлены следующие показатели биохимического состава семян перца сладкого сорта «Подарок Молдовы»: содержание белка в водном экстракте семян составило 24.6%; сумма свободных аминокислот в пересчете на кислоту глютаминовую и абсолютно сухое сырье – 4.3%; содержание жира составило 14.2%; клетчатки – 6.8%; сумма восстанавливающих и невосстанавливающих сахаров – 4.8% (восстанавливающих – 3.6%, сахарозы – 1.2%). Суммарное содержание алкалоидов, в семенах перца сорта «Подарок Молдовы» составило 1.6%, аскорбиновой кислоты – 2.6%.

Масло из семян перца сладкого сорта «Подарок Молдовы» представляет собой желтую, прозрачную, вязкую жидкость с приятным характерным запахом овоща, с выходом 14%. В образце масла идентифицированы линолевая (71.65%), пальмитиновая (13.87%), олеиновая (9.26%), стеариновая (3%) кислоты. Обнаружены также элаидиновая (1.96%) и гексадециновая (0.26%) кислоты (табл. 1), что, вероятно, обусловлено сортовыми особенностями растения и почвенно-климатическими условиями Астраханской области.

При оценке потенциальных видов фармакологической активности компонентов масла учитывали величину показателя вероятности проявления фармакологической активности (P_a), который показывает принадлежность исследуемого компонента к подклассу активных соединений. Определяли величину разности между значениями показателей вероятности проявления (P_a) и отсутствия фармакологической активности (P_i) для конкретного компонента, которая указывает на возможность обнаружения данного вида фармакологической активности в натурном эксперименте.

Как видно из таблицы 2, представленные компоненты демонстрируют стабильно высокие значения вероятностей проявления вазопротекторной, антимутагенной, мембранопротекторной, цитопротекторной и антигипоксической активностей. На основании полученных результатов можно предположить, что исследуемые компоненты вполне оправданно могут быть использованы в сочетательной терапии при медикаментозном лечении аденоматозного полипоза и лечении предопухолевых состояний.

Таблица 1. Содержание жирных кислот в СКФ-экстрактах семян перца сладкого сорта «Подарок Молдовы»

Жирные кислоты		Содержание от цельного масла, %
Гексадеценовая		0.26
Пальмитиновая		13.87
Линолевая		71.65
Олеиновая		9.26
Элаидиновая		1.96
Стеариновая		3.00
Итого		100

Таблица 2. Результаты прогноза фармакологической активности основных компонентов масла сладкого перца сорта «Подарок Молдовы» ($P_a > 0.70$) по данным *PASS-online*

Фармакологическая активность	Линолевая кислота		Пальмитиновая кислота		Олеиновая кислота		Стеариновая кислота		Элаидиновая кислота		Гексадеценовая кислота	
	P_a	P_i	P_a	P_i	P_a	P_i	P_a	P_i	P_a	P_i	P_a	P_i
Агонист колониестимулирующего фактора макрофагов	0.910	0.002	0.891	0.002	0.920	0.002	0.891	0.002	0.920	0.002	0.920	0.002
Агонист целостности мембран	0.753	0.045	0.857	0.022	0.807	0.035	0.857	0.022	0.807	0.035	0.807	0.035
Антагонист холестерина	0.804	0.004	0.723	0.007	0.798	0.005	0.723	0.007	0.798	0.005	0.798	0.005
Антимутагенный	0.792	0.004	0.783	0.004	0.852	0.003	0.783	0.004	0.852	0.003	0.852	0.003
Антагиперхолестеринемический	0.774	0.004	–	–	0.744	0.006	–	–	0.744	0.006	0.744	0.006
Антисеборейный	0.771	0.024	0.866	0.008	0.803	0.019	0.866	0.008	0.803	0.019	0.803	0.019
Антитромботический	0.732	0.006	–	–	0.707	0.007	–	–	0.707	0.007	0.707	0.007
Антагипоксический	0.701	0.008	0.798	0.004	0.743	0.005	0.798	0.004	0.743	0.005	0.743	0.005
Вазопротектор	0.852	0.004	0.834	0.004	0.872	0.003	0.834	0.004	0.872	0.003	0.872	0.003
Желчегонный	–	–	–	–	0.728	0.004	–	–	0.728	0.004	0.728	0.004
Инсулиновый промоутер	–	–	0.753	0.004	–	–	0.753	0.004	–	–	–	–
Лечение аденоматозного полипоза	0.761	0.004	0.819	0.002	0.776	0.003	0.819	0.002	0.776	0.003	0.776	0.003
Лечение предопухолевых состояний	0.769	0.004	0.821	0.003	0.791	0.004	0.821	0.003	0.791	0.004	0.791	0.004
Лечение фобических расстройств	0.900	0.005	0.939	0.003	0.912	0.004	0.939	0.003	0.912	0.004	0.912	0.004
Лечение мукозита	0.811	0.013	0.874	0.008	0.839	0.011	0.874	0.002	0.839	0.011	0.839	0.011
Мукомембранный протектор	0.949	0.003	0.933	0.004	0.958	0.003	0.933	0.004	0.958	0.003	0.958	0.003
Противовоспалительное средство (кишечное)	0.730	0.012	0.727	0.002	0.685	0.003	0.727	0.002	–	–	–	–
Противоэозематический	–	–	0.920	0.004	0.947	0.003	0.920	0.004	0.947	0.003	0.947	0.003
Регулятор липидного обмена	0.920	0.003	0.808	0.005	0.908	0.004	0.808	0.005	0.908	0.004	0.908	0.004
Стимулятор агрегации тромбоцитов	0.829	0.002	0.812	0.002	0.838	0.001	0.812	0.002	0.837	0.003	0.838	0.001
Стимулятор лейкопоэза	0.775	0.004	0.854	0.002	0.797	0.003	0.854	0.002	0.797	0.003	0.797	0.003
Фибринолитик	0.713	0.018	0.780	0.005	0.734	0.013	0.780	0.005	0.734	0.013	0.734	0.013
Цитопротектор	0.721	0.004	0.712	0.004	0.737	0.004	0.712	0.004	0.737	0.004	0.737	0.004

Примечание: P_a – значение вероятности проявления фармакологической активности; P_i – значение вероятности отсутствия фармакологической активности для исследуемых компонентов.

Необходимо также отметить, что все соединения являются агонистами целостности мембран и проявляют максимальную противоэозематическую и антисеборейную активности. Исследуемые компоненты, входящие в состав перца, могут быть также отнесены к фибронолитикам, с проявлением антитромботического эффекта (исключения – пальмитиновая и стеариновая кислоты).

С использованием сервисных ресурсов, представленных в *PASS-online*, для основных компонентов были также спрогнозированы антибактериальная, противогрибковая и противовирусная виды активности [17–19]. Необходимо отметить, что данные для обучающей выборки по антибактериальному действию

химических соединений извлечены из базы данных ChEMBL [20–22]. При этом соединения, обладающие минимальными ингибирующими концентрациями ≤ 10000 нМ, могут быть классифицированы как активные соединения в диапазоне значений 0.75 до 1.00.

Из данных таблицы 3 следует, что практически все соединения могут быть классифицированы как неактивные на основании результатов P_a , обладая слабовыраженными антибактериальными, противогрибковыми и противовирусными свойствами. Средняя активность наблюдается лишь в некоторых случаях:

- 1) линолевая кислота активна в отношении грамположительного штамма *Staphylococcus simulans*;
- 2) пальмитиновая и стеариновая кислоты активны к малопатогенным стрептококковым бактериям *Streptococcus viridans*;
- 3) все соединения показывают некоторую активность в отношении штаммов вирусной инфекции Денге, передающейся к человеку от комаров.

Полученные сведения представляют интерес, поскольку позволяют определить виды фармакологической активности, на которые следует, в первую очередь, обратить внимание при постановке *in vivo* и *in vitro* экспериментов, а также при поиске активных мишеней в белковых, ферментных системах посредством моделирования межмолекулярных контактов методами *in silico*.

Таблица 3. Результаты прогноза антибактериальной, противогрибковой и противовирусной видов активности основных компонентов сладкого перца по данным сервисных ресурсов *PASS-online*

Вид микробиоты	Линолевая кислота	Пальмитиновая кислота	Олеиновая кислота	Стеариновая кислота	Элаидиновая кислота	Гексадеценовая кислота
	P_a	P_a	P_a	P_a	P_a	P_a
Антибактериальная активность						
<i>Staphylococcus simulans</i>	0.670	0.159	0.486	0.159	0.486	0.486
<i>Streptococcus viridans</i>	0.464	0.619	0.512	0.619	0.512	0.512
<i>Clostridium ramosum</i>	0.243	0.527	0.320	0.527	0.320	0.320
<i>Salmonella enteritidis</i>	0.352	0.525	0.391	0.525	0.391	0.391
<i>Lactobacillus plantarum</i>	0.389	0.404	0.411	0.404	0.411	0.411
Противогрибковая активность						
<i>Saccharomyces cerevisiae</i>	0.411	0.143	0.218	0.143	0.218	0.218
<i>Clavispora lusitaniae</i>	0.386	0.299	0.412	0.299	0.412	0.412
<i>Mucor</i>	0.353	0.409	0.371	0.409	0.371	0.371
<i>Rhizopus oryzae</i>	0.173	0.371	0.231	0.371	0.231	0.231
Противовирусная активность						
Вирус Денге 2 типа	0.591	0.698	0.630	0.698	0.630	0.630
Тяжелый острый респираторный синдром коронавируса 2	0.295	0.488	0.358	0.488	0.358	0.358
Вирус ветряной оспы (штамм Дюма)	0.112	0.217	0.142	0.217	0.142	0.142
Вирус осповакцины (штамм Western Reserve)	0.077	0.256	0.130	0.256	0.130	0.130
Вирус простого герпеса (тип 1/штамм 17)	0.112	0.217	0.142	0.217	0.142	0.142

Финансирование

Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Астраханского государственного университета имени В.Н. Татищева. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Открытый доступ

Эта статья распространяется на условиях международной лицензии Creative Commons Attribution 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), которая разрешает неограниченное использование, распространение и воспроизведение на любом носителе при условии, что вы дадите соответствующие ссылки на автора(ов) и источник, предоставите ссылку на Лицензию Creative Commons и укажете, были ли внесены изменения.

Список литературы

- Сулейманова Л.Р., Куркин В.А. Фитохимическое исследование препаратов и сырья на основе стручкового перца (*Capsicum annuum* L.) // Известия Самарского научного центра РАН. 2009. Т. 11, №1 (6). С. 1311–1134.
- Косенко М.Г., Бирюкова Н.В. Фитохимический анализ отходов переработки плодов перца сладкого стручкового однолетнего (*Capsicum annuum* L.) // The scientific heritage. 2021. №66. С. 6–9. <https://doi.org/10.24412/9215-0365-2021-66-2-6-9>.
- Завьялова О.А. Фармакогностическое изучение плодов перца однолетнего и разработка методов стандартизации липидного комплекса на его основе: автореф. дис. ... канд. хим. наук. М., 2005. 24 с.
- Курочкин А.А., Долгов М.В. Поликомпонентный экструдат на основе семян перца // Инновационная техника и технология. 2023. Т. 10, №1. С. 64–68.
- Попков В.А., Решетняк В.Ю., Нестерова О.В., Завьялова О.А., Абрамов А.А., Кукина Т.П., Покровский Л.М. Физико-химические показатели масла из семян сладкого перца // Вестник Московского университета. Сер. 2. Химия. 2004. Т. 45, №6. С. 413–416.
- Matsufuji H., Nakamura H., Chino M., Takeda M. Antioxidant Activity of Capsanthin and the Fatty Acid Esters in Paprika (*Capsicum annuum*) // J. Agric. Food Chem. 1998. Vol. 46. Pp. 3468–3472. <https://doi.org/10.1021/jf980200i>.
- Skalicka-Wozniak K., Losb R., G³owniaka K., Malm A. Antimicrobial Activity of Fatty Acids from Fruits of *Peucedanum cervaria* and *P. alsaticum* // Chemistry & Biodiversity. 2010. Vol. 7. Pp. 2748–2754. <https://doi.org/10.1002/cbdv.201000008>.
- Koz³owska M., Gruczyn'ska E., S'cibisz B., Rudzin'ska M. Fatty acids and sterols composition, and antioxidant activity of oils extracted from plant seeds // Food Chemistry. 2016. Vol. 213. Pp. 450–456.
- Ковалев В.Б., Великородов А.В., Тырков А.Г., Носачев С.Б., Щепетова Е.В., Абдурахманова Н.М. Химический состав масел семян некоторых бахчевых культур Астраханской области, выделенных методом сверхкритической флюидной экстракции // Фундаментальные исследования. 2015. №12 (1). С. 54–57.
- Починок Х.Н. Методы биохимического исследования растений. Киев, 1976. 336 с.
- Постоюк Н.А. Методика количественного определения суммы аминокислот в листе каштана конского обыкновенного // Новые задачи современной медицины: материалы Международной научной конференции. Пермь, 2012. С. 139–141.
- Калинкина Г.И., Сальникова Е.Н., Исайкина Н.В., Коломиец Н.Э. Методы фармакогностического анализа лекарственного растительного сырья. В 2-х ч. Ч. II. Химический анализ: учебное пособие. Томск, 2008. 55 с.
- Коренская И.М., Ивановская Н.П., Колосова О.А. Лекарственные растения и лекарственное растительное сырье, содержащее витамины, полисахариды, жирные масла: учебно-методическое пособие для сам. работы студ. фарм. факультета. Воронеж, 2008. 57 с.
- Великородов А.В., Пилипенко В.Н., Пилипенко Т.А., Тырков А.Г. Изучение химического состава эфирного масла *Tamarix Ramosissima* // Химия растительного сырья. 2017. №4. С. 117–120. <https://doi.org/10.14258/jcprm.2017042041>.
- Lagunin A., Zakharov A., Filimonov D., Poroikov V. QSAR Modelling of Rat Acute Toxicity on the Basis of PASS Prediction // Mol. Informatics. 2011. Vol. 30(2-3). Pp. 241–250. <https://doi.org/10.1002/minf.201000151>.
- Wang Z., Zhao P., Zhang X., Xu X., Li W., Liu G., Tang Y. *In silico* prediction of chemical respiratory toxicity via machine learning // Computational Toxicology. 2021. Vol. 18(3). 100155. <https://doi.org/10.1016/j.comtox.2021.100155>.
- Pogodin P.V. et al. PASS Targets: Ligand-based multi-target computational system based on a public data and naïve Bayes approach // SAR and QSAR in Environmental Research. 2015. Vol. 26(10). Pp. 783–793. <https://doi.org/10.1080/1062936X.2015.1078407>.
- Pogodin P. How to Achieve Better Results Using PASS-Based Virtual Screening: Case Study for Kinase Inhibitors // Frontiers in chemistry. 2018. Vol. 6. 133. <https://doi.org/10.3389/fchem.2018.00133>.
- Filimonov D.A. Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource // Chemistry of Heterocyclic Compounds. 2014. Vol. 50(3). Pp. 444–457. <https://doi.org/10.1007/s10593-014-1496-1>.
- Poroikov V.V. Computer-aided prediction of biological activity spectra for organic compounds: the possibilities and limitations // Russ. Chem. Bull. 2019. Vol. 68 (12). Pp. 2143–2154. <https://doi.org/10.1007/s11172-019-2683-0>.
- Gaulton A., Hersey A., Nowotka M., Bento P., Chambers J., Mendez D., Mutowo P., Atkinson F., Bellis L., Cibrián-Uhalte E., Davies M., Dedman N., Karlsson A., Magariños M., Overington J., Papadatos G., Smit I., Leach A. The ChEMBL database in 2017 // Nucleic Acids Res. 2017. Vol. 45(D1). Pp. D945–D954. <https://doi.org/10.1093/nar/gkw1074>.
- Lee J.W., Maria-Solano M.A., Vu T.N.L., Yoon S., Choi S. Big data and artificial intelligence (AI) methodologies for computer-aided drug design (CADD) // Biochem. Soc. Trans. 2022. Vol. 50(1). Pp. 241–252. <https://doi.org/10.1042/BST20211240>.

Поступила в редакцию 26 апреля 2024 г.

После переработки 11 июня 2024 г.

Принята к публикации 13 ноября 2024 г.

Schepetova Ye.V., Zolotareva N.V. INVESTIGATION OF THE BIOCHEMICAL COMPOSITION OF SEEDS AND IN SILICO DETERMINATION OF THE PHARMACOLOGICAL ACTIVITY OF THE COMPONENTS OF SWEET PEPPER OIL*

*Astrakhan State University named after. V.N. Tatischcheva, pl. Shaumyana, 1, Astrakhan, 414000, Russia,
schepetova75@yandex.ru*

The article presents the results of determining the biochemical composition of pepper seeds of the sweet variety "Gift of Moldova" extracted from ripe fruits of plants grown in a suburban area within the city of Astrakhan. The spare nutrients of the seeds are represented by proteins (24.6%), carbohydrates (4.8%), fats (14.2%), fiber (6.8%), the content of ascorbic acid in the seeds is 6%, alkaloids 1.6%. By the method of supercritical fluid extraction from the seeds of the sweet pepper variety "Gift of Moldova", an oil with a yield of 14% was obtained, the fatty acid composition of the oil was determined using the chromatography method. The main components of the oil are linoleic (71.65%), palmitic (13.87%), oleic (9.26%), stearic (3%) acids. Elaidic (1.96%) and hexadecenic (0.26%) acids were also found. For the identified components of seed oil, potential types of pharmacological activity were evaluated using the PASS-online and admetSAR web resources. All the studied components showed weakly expressed antibacterial, antifungal and antiviral properties, some activity against strains of Dengue virus infection transmitted to humans from mosquitoes. Linoleic acid is active against the gram-positive strain of *Staphylococcus simulans*. Palmitic and stearic acids are active against the low-pathogenic streptococcal bacteria *Streptococcus viridans*.

Keywords: sweet pepper, seeds, biochemical composition, oil, fatty acid composition, pharmacological activity.

For citing: Schepetova Ye.V., Zolotareva N.V. *Khimiya Rastitel'nogo Syr'ya*, 2025, no. 2, pp. 207–214. (in Russ.).
<https://doi.org/10.14258/jcprm.20250215127>.

References

1. Suleymanova L.R., Kurkin V.A. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra RAN*, 2009, vol. 11, no. 1 (6), pp. 1311–1134. (in Russ.).
2. Kosenko M.G., Biryukova N.V. *The scientific heritage*, 2021, no. 66, pp. 6–9. <https://doi.org/10.24412/9215-0365-2021-66-2-6-9>. (in Russ.).
3. Zav'yalova O.A. *Farmakognosticheskoye izuchenie plodov persta odnoletnogo i razrabotka metodov standarti-zatsii lipidnogo kompleksa na yego osnove: avtoref. dis. ... kand. khim. nauk.* [Pharmacognostic study of annual pepper fruits and development of methods for standardization of the lipid complex based on it: author's abstract. diss. ... candidate of chemical sciences]. Moscow, 2005, 24 p. (in Russ.).
4. Kurochkin A.A., Dolgov M.V. *Innovatsionnaya tekhnika i tekhnologiya*, 2023, vol. 10, no. 1, pp. 64–68. (in Russ.).
5. Popkov V.A., Reshetnyak V.Yu., Nesterova O.V., Zav'yalova O.A., Abramov A.A., Kukina T.P., Pokrovskiy L.M. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Ser. 2. Khimiya*, 2004, vol. 45, no. 6, pp. 413–416. (in Russ.).
6. Matsufuji H., Nakamura H., Chino M., Takeda M. *J. Agric. Food Chem.*, 1998, vol. 46, pp. 3468–3472. <https://doi.org/10.1021/jf980200i>.
7. Skalicka-Wozniak K., Losb R., Glocniaka K., Malm A. *Chemistry & Biodiversity*, 2010, vol. 7, pp. 2748–2754. <https://doi.org/10.1002/cbdv.201000008>.
8. Kozlowska M., Gruczyn'ska E., S'cibisz I., Rudzin'ska M. *Food Chemistry*, 2016, vol. 213, pp. 450–456.
9. Kovalev V.B., Velikorodov A.V., Tyrkov A.G., Nosachev S.B., Shchepetova Ye.V., Abdurakhmanova N.M. *Fundamental'nyye issledovaniya*, 2015, no. 12 (1), pp. 54–57. (in Russ.).
10. Pochinok Kh.N. *Metody biokhimicheskogo issledovaniya rastenij*. [Methods of biochemical research of plants]. Kyiv, 1976, 336 p. (in Russ.).
11. Postoyuk N.A. *Novyye zadachi sovremennoy meditsiny: materialy Mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii*. [New tasks of modern medicine: materials of the International scientific conference]. Perm', 2012, pp. 139–141. (in Russ.).
12. Kalinkina G.I., Sal'nikova Ye.N., Isaykina N.V., Kolomiyets N.E. *Metody farmakognosticheskogo analiza lekarstvennogo rastitel'nogo syr'ya. V 2-kh ch. Ch. II. Khimicheskiy analiz: uchebnoye posobiye*. [Methods of pharmacognostic analysis of medicinal plant materials. In 2 parts. Part II. Chemical analysis: a textbook]. Tomsk, 2008, 55 p. (in Russ.).
13. Korenskaya I.M., Ivanovskaya N.P., Kolosova O.A. *Lekarstvennyye rasteniya i lekarstvennoye rastitel'noye syr'ye, soderzhashcheye vitaminy, polisakharidy, zhirnyye masla: uchebno-metodicheskoye posobiye dlya sam. raboty stud. farm. fakul'teta*. [Medicinal plants and medicinal plant raw materials containing vitamins, polysaccharides, fatty oils. Study guide for independent work of students of the Faculty of Pharmacy]. Voronezh, 2008, 57 p. (in Russ.).
14. Velikorodov A.V., Pilipenko V.N., Pilipenko T.A., Tyrkov A.G. *Khimiya rastitel'nogo syr'ya*, 2017, no. 4, pp. 117–120. <https://doi.org/10.14258/jcprm.2017042041>. (in Russ.).
15. Lagunin A., Zakharov A., Filimonov D., Poroikov V. *Mol. Informatics.*, 2011, vol. 30(2-3), pp. 241–250. <https://doi.org/10.1002/minf.201000151>.
16. Wang Z., Zhao P., Zhang X., Xu X., Li W., Liu G., Tang Y. *Computational Toxicology*, 2021, vol. 18(3), 100155. <https://doi.org/10.1016/j.comtox.2021.100155>.
17. Pogodin P.V. et al. *SAR and QSAR in Environmental Research*, 2015, vol. 26(10), pp. 783–793. <https://doi.org/10.1080/1062936X.2015.1078407>.
18. Pogodin P. *Frontiers in chemistry*, 2018, vol. 6, 133. <https://doi.org/10.3389/fchem.2018.00133>.
19. Filimonov D.A. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 2014, vol. 50(3), pp. 444–457. <https://doi.org/10.1007/s10593-014-1496-1>.

* Corresponding author.

20. Poroikov V.V. *Russ. Chem. Bull.*, 2019, vol. 68 (12), pp. 2143–2154. <https://doi.org/10.1007/s11172-019-2683-0>.
21. Gaulton A., Hersey A., Nowotka M., Bento P., Chambers J., Mendez D., Mutowo P., Atkinson F., Bellis L., Cibrián-Uhalte E., Davies M., Dedman N., Karlsson A., Magariños M., Overington J., Papadatos G., Smit I., Leach A. *Nucleic Acids Res.*, 2017, vol. 45(D1), pp. D945–D954. <https://doi.org/10.1093/nar/gkw1074>.
22. Lee J.W., Maria-Solano M.A., Vu T.N.L., Yoon S., Choi S. *Biochem. Soc. Trans.*, 2022, vol. 50(1), pp. 241–252. <https://doi.org/10.1042/BST20211240>.

Received April 26, 2024

Revised June 11, 2024

Accepted November 13, 2024

Сведения об авторах

Щепетова Екатерина Владимировна – кандидат биологических наук, доцент кафедры фундаментальной и прикладной химии, schepetova75@yandex.ru
Золотарева Наталья Валерьевна – кандидат технических наук, доцент кафедры фундаментальной и прикладной химии, zoloto.chem@mail.ru

Information about authors

Schepetova Ekaterina Vladimirovna – candidate of biological sciences, associate professor of the department of fundamental and applied chemistry, schepetova75@yandex.ru
Zolotareva Natalia Valeryevna – candidate of technical sciences, associate professor of the department of fundamental and applied chemistry, zoloto.chem@mail.ru