

## Effect of the Molecular Properties of Diallyl Trisulfide Analogues on ROS Production

Xiaoyan HE\*

College of Pharmaceutical Sciences,  
Southwest University, Chongqing 400716, China

---

**SUMMARY.** The novel diallyl trisulfide analogues were designed, synthesized and assayed for the possible effect on the production of reactive oxygen species including superoxide anion ( $O_2^-$ ), hydrogen peroxide ( $H_2O_2$ ) and hydroxyl radical ( $OH\cdot$ ) in phorbol myristate acetate stimulated peritoneal macrophages. A set of molecular properties of diallyl trisulfide and its analogues (DATSs) were analyzed *via* the semiempirical method, to compare with the results of activity assays. The results have shown that the release of  $O_2^-$ ,  $H_2O_2$  and  $OH\cdot$  in macrophages was affected by DATSs. Compound DATS-2 exhibited the most potent enhanced effect among all the compounds on all the three kinds of reactive oxygen species production in macrophages. The preliminary structure-activity relationship (SAR) was initially investigated in the study.

**RESUMEN.** Nuevos análogos de trisulfuro de dialilo se diseñaron, sintetizaron y ensayaron para estudiar su posible efecto sobre la producción de especies reactivas de oxígeno, incluyendo el anión superóxido  $O_2^-$ , peróxido de hidrógeno ( $H_2O_2$ ) y el radical hidroxilo ( $OH\cdot$ ) en macrófagos peritoneales estimulados por acetato de forbol miristato. Se analizó un conjunto de propiedades moleculares de trisulfuro de dialilo y sus análogos (DATSs) a través del método semiempírico, para comparar los resultados con los ensayos de actividad. Los resultados han mostrado que la liberación de  $O_2^-$ ,  $H_2O_2$  y  $OH\cdot$  en los macrófagos se vio afectada por DATSs. El compuesto DATS-2 exhibe el efecto más potente entre todos los compuestos sobre todos los tres tipos de producción de especies reactivas del oxígeno en los macrófagos. La relación estructura-actividad (SAR) preliminar fue investigada inicialmente en el estudio.

---

**KEY WORDS:** diallyl trisulfide; reactive oxygen species, charge, Log *p*.

\* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: hxy0626@163.com