

ИЗУЧЕНИЕ АНТИГРИППОЗНОЙ АКТИВНОСТИ АЗОЛО-АДАМАНТАНОВ

Лысейко Л.Н.

Научный руководитель – проф. каф. «Органических и фармацевтических технологий», док. хим. наук

Кузьмин В.Е.

За последние годы широкое развитие получили исследования в области количественных соотношений "структура-активность/свойство" (QSAR/QSPR) органических соединений. Это объясняется в первую очередь тем, что выявление подобных зависимостей экономит время и ресурсы при конструировании новых высокоэффективных лекарственных средств, а также способствует лучшему пониманию механизмов функционирования новых материалов, реагентов и препаратов. Использование компьютерных технологий открывает возможность на базе выявленных закономерностей проводить не только предварительный отсев (скрининг), но и молекулярный дизайн органических соединений обладающих комплексом полезных свойств.

Задачи исследования:

- количественный анализ влияния структуры азоло-аданамантанов на их антигриппозную активность
- использование полученных моделей для вне экспериментального скрининга активностей, дизайна новых перспективных соединений.

Этапы решения задач QSAR

1. Проверка соединений

- 1.1 удаление неорганики из смесей (ионов металлов, минеральных кислот)
- 1.2 структурная чистка (конвертирование)
- 1.3 стандартизация
- 1.4 удаление дубликатов

2. Симплексное представление молекулярной структуры

Симплекс – четырёхатомные молекулярные фрагменты, фиксированной структуры.

3. Дизайн новых соединений

Была проведена проверка соединений и очистка выборки от «шумов», рассчитано около 5 тысяч дескрипторов (количество симплексов в молекуле).

Далее планируется получение моделей соединений, проверка их прогнозирующей способности и проведение дизайна новых, еще не известных, соединений с высокой антигриппозной активностью, селективностью и низкой токсичностью, использование их для дальнейшего синтеза и проверки биологической активности.