

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции

“Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов”.

http://butlerov.com/natural_resources/

УДК 547.92+615.015.11. Поступила в редакцию 14 мая 2006 г.

Достижения и проблемы в области изучения, использования и прогнозирования биологической активности экдистероидов

© Тимофеев Николай Петрович

Кафедра химии. Поморский государственный университет им. М.В. Ломоносова. г. Коряжма.

Ул. Ленина, 47А-55, г. Коряжма. Архангельская обл.165650. Россия. Тел: (818 50) 5-97-33.

E-mail: timfbio@atnet.ru

Ключевые слова: экдистероиды, 20-гидроксиэкдизон, ponasterone, muristerone, лиганды и рецепторы, моделирование активности.

Аннотация

Проанализирована биологическая активность экдистероидов, исходя из базы данных структурного разнообразия и ключевых моментов взаимодействия с рецепторами. Показаны современные достижения в области изучения активности индивидуальных соединений методами биотестирования, прогнозирования активности программными средствами CoMFA и 4D-QSAR, молекулярного конструирования усовершенствованных конструкций рецепторов. Рассмотрены механизмы, ограничения и условия, необходимые для проявления фармакологической активности экдистероидов в медицине.

Содержание

1. Физиологические действия экдистероидов
2. Фармакологическое использование
3. Активность экдистероидов в биотестах
4. Исследования в области компьютерного моделирования активности
 - 4.1. Базы данных структурного разнообразия экдистероидов
 - 4.1. Результаты экспериментов по моделированию активности лигандов
5. Исследования в области конструирования рецепторов
 - 5.1. Особенности лиганд-рецепторного взаимодействия экдистероидов
 - 5.2. Перспективы конструирования усовершенствованных моделей рецепторов
6. Активность экдистероидов в медицине
 - 6.1. Различия в активности экдистероид содержащих составов
 - 6.2. Кофакторы активности
 - 6.3. Взаимодействия со стрессовыми белками
 - 6.4. Эффекты с трансмембранными рецепторами