

Интеграция компьютерных систем для дизайна и прогноза химических соединений с различными аспектами их действия

© Тюрина Лидия Аркадьевна,^{*†} Кирлан Светлана Анатольевна,
Колбин Александр Михайлович, Тюрина Ольга Владимировна
и Соломина Татьяна Сергеевна

Государственное учреждение «Научно-исследовательский технологический институт гербицидов и регуляторов роста растений с опытно-экспериментальным производством Академии наук республики Башкортостан». Ул. Ульяновых, д.29. г. Уфа, 450029. Республика Башкортостан. Россия.
Тел.: (347) 242-83-52. E-mail: tjurina@anrb.ru

*Ведущий направление; †Поддерживающий переписку

Ключевые слова: связь «структура – активность», молекулярный дизайн, прогноз активности и токсичности, прогнозные комплексы, ван-дер-ваальсовы объемы, карты электростатических потенциалов молекул.

Аннотация

Разработана и апробирована система прогноза и молекулярного дизайна биологически активных соединений «SARD–SARDTOX–OVOLMER». Она включает три подсистемы:

- 1) компьютерную систему молекулярного дизайна и прогноза – «SARD-21»;
- 2) систему прогноза токсических характеристик «SARDTOX»;
- 3) систему определения сходства и различия молекул на основе квантово-химических характеристик – «OVOLMER». Система позволяет проводить поиск химических соединений с определённым комплексом биологических и токсических характеристик. Использование данных по электронному и энергетическому строению даёт возможность дополнительного обоснования выбора наиболее перспективных структур и формирования предпосылок для выдвижения гипотез о механизмах действия.