

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Взаимосвязь «структура – активность». Регистрационный код публикации: 10-20-5-16 Подраздел: Биохимия.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции «Бутлеровские чтения». <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.165+615.22. Поступила в редакцию 2 июля 2010 г.

Тематическое направление: Изучение взаимосвязи «структура-свойство» в ряду эффективных ингибиторов каталитической активности липоксигеназ. Часть 1.

Изучение закономерностей в строении эффективных ингибиторов 15-липоксигеназы методами теории распознавания образов и QSAR

© Хайруллина Вероника Радиевна,¹⁺ Герчиков Анатолий Яковлевич,^{1*} Boegel Horst,² Entzian Alexander² и Зарудий Феликс Александрович³

¹ Кафедра физической химии и химической экологии. Башкирский государственный университет. Ул. З. Валиди, 32. г. Уфа, 420074. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (347) 273-67-27. E-mail: Veronika1979@yandex.ru, gerchikovv@inbox.ru

² Institut für Chemie. Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. Deutschland.

Kurt-Mothes-Str. Halle, D-06120 Halle. Tel.: +49 (0345) 552-56-28. E-mail: boegel@chemie.uni-halle.de

³ Кафедра фармакологии №1. Башкирский государственный медицинский университет. Ул. Ленина, 3. г. Уфа, 450000. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 273-75-81. E-mail: zarudiy@anrb.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: теория распознавания образов, теория игр, дескрипторы, ингибиторы 15-липоксигеназы, молекулярный дизайн.

Аннотация

С использованием компьютерной системы SARD-21 (*Structure Activity Relationship & Design*) и QSAR-методологии найдены дескрипторы, характерные для эффективных ингибиторов каталитической активности 15-липоксигеназы (15-ЛОГ). На базе этой информации построены две модели прогноза интервальных уровней ингибирующей активности и две линейные регрессионные модели прогноза численных значений IC_{50} для серу-, азот- и кислородсодержащих гетероциклических соединений для фермента 15-ЛОГ. Выявленные структурные закономерности применены для структурной модификации [1-(4-хлорбензол)-5-метокси-2-метил-1*H*-индол-3-ил] уксусной кислоты (действующее вещество нестероидного противовоспалительного лекарственного средства – «индометацин»), в результате которой получено 33 потенциально высоко- и и среднеэффективных ингибиторов 15-ЛОГ.