

Тематическое направление: Изучение взаимосвязи «структура – свойство» в ряду органических соединений с выраженной противоопухолевой активностью. Часть 1.

## **Исследование связи “структура – противоопухолевая активность” в отношении клеток серии hepg2, hela, Hvr100-6, DU-145 в ряду разных классов гетероциклических соединений**

© Хайруллина Вероника Радиевна,<sup>1+</sup> Дубинина Евгения Владиславовна,<sup>1+</sup>  
Зарудий Феликс Срульевич,<sup>3</sup> Герчиков Анатолий Яковлевич,<sup>1\*</sup>  
Файзуллина Лилия Халитовна<sup>2</sup> и Галин Фанур Зуфарович<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 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, gerchikov@inbox.ru

<sup>2</sup> Институт органической химии Уфимского научного центра РАН.

Ул. Проспект Октября, 71. г. Уфа, 450054. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (3472) 35-55-60. E-mail: chemorg@anrb.ru

<sup>3</sup> 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; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** теория распознавания образов, дескрипторы, виртуальный скрининг, противоопухолевая активность.

### **Аннотация**

С использованием компьютерной системы SARD-21 (Structure Activity Relationship & Design) выявлены структурные признаки, характерные для высоко-, средне- и низкоэффективных противоопухолевых соединений, оценена степень их влияния на раковые клетки гепатомы, шейки матки и простаты. На основании полученных данных, построены две модели прогноза интервальных уровней противоопухолевой активности серу-, азот-, кремний- и кислородсодержащих гетероциклических соединений с уровнем достоверного прогноза 80% по двум методам распознавания. Выявленные структурные закономерности могут быть использованы для конструирования высокоактивных противоопухолевых соединений.