

Тематическое направление: Изучение взаимосвязи «структура – свойство» в ряду органических соединений с выраженной противоопухолевой активностью. Часть 2.

Выявление структурных признаков лекарственных препаратов для лечения протоковой инвазивной карциномы молочной железы серии MCF-7

© Дубинина Евгения Владиславовна,¹⁺ Хайруллина Вероника Радиевна,¹⁺
Герчиков Анатолий Яковлевич,^{1*} Файзуллина Лилия Халитовна,²
Галин Фанур Зуфарович¹ и Зарудий Феликс Срульевич³

¹ Башкирский государственный университет. Ул. З. Валиди, 32. г. Уфа, 420074.

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

² Институт органической химии Уфимского научного центра Российской Академии наук.
Ул. Проспект Октября, 71. г. Уфа, 450054. Тел.: (3472) 35-5560. E-mail: chemorg@anrb.ru

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

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: теория распознавания образов, дескрипторы, виртуальный скрининг, противоопухолевая активность, карцинома протоков молочной железы.

Аннотация

С использованием компьютерной системы SARD-2I (Structure Activity Relationship & Design) выявлены структурные признаки, характерные для высоко-, средне- и низкоэффективных противоопухолевых соединений, оценена степень их влияния на опухолевые клетки инвазивной аденокарциномы протоков молочной железы. На основании полученных данных, построена модель прогноза интервальных уровней противоопухолевой активности в ряду серу-, азот-, и кислородсодержащих гетероциклических соединений с уровнем достоверного прогноза 80% по двум методам распознавания. Выявленные структурные закономерности могут быть использованы для конструирования новых противоопухолевых препаратов.