

Тематический раздел: Биохимические исследования.

Подраздел: Химия пептидов.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей

интернет-конференции “Химические основы рационального использования возобновляемых природных ресурсов”.

http://butlerov.com/natural_resources/

Статья публикуется по материалам конференции “Новые химико-фармацевтические технологии-2012”

УДК 54.057:547.96:615.273.5. Поступила в редакцию 14 октября 2012 г.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 12-32-11-96

Тематическое направление: Пептидные ингибиторы агрегации тромбоцитов. Часть 1.

Пептидные ингибиторы агрегации тромбоцитов: математическое моделирование, синтез и оценка специфической активности новых соединений в условиях *in vitro*

© Алексеев^{1*+} Алексей Анатольевич, Брылев^{1*+} Максим Игоревич,
Королев^{1*} Вячеслав Леонидович, Лоторев¹ Дмитрий Сергеевич,
Лизунов² Антон Юрьевич, Батуев³ Евгений Андреевич
и Павлова^{1*} Людмила Анатольевна

¹ Лаборатория биологически активных соединений НИИ фармации. Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова. Ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (495) 708-39-71. E-mail: alexeevalexei1991@mail.ru.

² Кафедра высшей математики. Московский физико-технический институт (государственный университет). Ул. Керченская, дом 1 "А", корпус 1. г. Москва, 117303. Россия. Тел.: (495) 408-45-54.

³ Кафедра органической химии. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. Ленинские горы, д. 1, стр. 3. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (495) 939-16-71.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: математическое моделирование, пептиды, рецепторы тромбоцитов, агрегация тромбоцитов, сердечно-сосудистые заболевания.

Аннотация

С применением программного комплекса «Алгокомб» выполнено математическое моделирование молекул пептидов – антагонистов GРIb/IIIa рецепторов тромбоцитов. По стандартному протоколу стратегии FastMoc 0.25 синтезировано одно из смоделированных соединений. Синтез пептида выполнен твердофазным способом на автоматическом пептидном синтезаторе, очистка произведена на препаративном хроматографе. Строение полученного соединения подтверждено методами ЯМР ¹H спектроскопии и хроматомасс-спектрометрии. Выполнена оценка специфичности действия синтезированного соединения *in vitro* на крови здоровых доноров и показано доз-зависимое снижение АДФ-индуцированной агрегации тромбоцитов.