

Количественный анализ структура – фунгицидная активность 1,2,3-тиадиазолов и 1,2,3-триазолов

© Прохорова¹⁺ Полина Евгеньевна, Глухарева¹ Татьяна Владимировна,
Калинина¹ Татьяна Андреевна, Нейн¹ Юлия Ивановна,
Fan² Zhi-Jin и Моржерин^{1*} Юрий Юрьевич

¹ Кафедра технологии органического синтеза. Химико-технологический институт.
Уральский федеральный университет. Ул. Мира, 19. г. Екатеринбург, 620002. Россия.
Тел.: (343) 374-48-18. E-mail: yu.yu.morzherin@urfu.ru

² State Key Laboratory of Elemento-Organic Chemistry. Nankai University. Weijin Road, 94. Nankai District,
Tianjin, 300071 China. Phone: +86-22-23499464. E-mail: fanzj@nankai.edu.cn

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 1,2,3-тиадиазолы, 1,2,3-триазолы, количественная зависимость структура – активность, фунгицидная активность, дескрипторы.

Аннотация

Тенденция к увеличению потери урожая от болезней растений является общемировой проблемой. Основная задача современных технологий конструирования как лекарственных, так сельскохозяйственных препаратов – разработка методов надежного предсказания биологической активности различных классов органических соединений. На основе QSAR-анализа для синтезированной библиотеки 1,2,3-тиадиазолов и 1,2,3-триазолов найдены количественные закономерности структура – фунгицидная активность в отношении для ряда активностей: *Verticilium dahliae* на хлопке, *Fusarium oxysporum cicuterinum* на огурцах, *Gibberella zeae* на пшенице. Для описания биологической активности молекул использовался метод регрессионного анализа. Показано, что несмотря на то, что 5-амино-1,2,3-тиадиазолы и 5-меркапто-1,2,3-триазолы имеют одинаковую последовательность атомов, эти соединения нельзя относить к одному скаффолды. Фунгицидная активность исследовалась на следующих объектах: *Fusarium oxysporum cicuterinum* – корневая гниль огурцов (С), *Gibberella zeae* – фузариоз колоса пшеницы (G), *Verticilium dahliae* – вертициллезный вилт хлопчатника (AF). Массив имеющихся данных для 38 тиадиазолов был разделен на два массива – «обучающий», содержащий N = 26 соединений, и «контрольный», содержащий 12 соединений. Для массива 1,2,3-триазолов из 21 соединения «обучающая» выборка составила N = 15 соединений, «контрольная» – 6. Установлено, что для 1,2,3-тиадиазолов фунгицидную активность определяют топологические дескрипторы, в то время как для 1,2,3-триазолов основную роль играют электронные дескрипторы. Для 1,2,3-тиадиазолов, проявляющих активность С в отношении *Fusarium oxysporum cicuterinum* на огурцах, показатели активности наиболее взаимосвязаны с такими дескрипторами как средний молекулярный вес, значение атомного Ван-дер-Ваальсового радиуса для атомов углерода, значение атомной поляризуемости для атомов углерода. На активность С в отношении *Fusarium oxysporum cicuterinum* на огурцах 1,2,3-триазолов влияет совершенно другой набор дескрипторов: теплота образования, электронная энергия, потенциал ионизации, энергия ВЗМО, количество вращающихся связей, количество атомов кислорода.