

СОВРЕМЕННЫЕ ДОСТИЖЕНИЯ В ОБЛАСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЛИГАНД-РЕЦЕПТОРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ И КОНСТРУИРОВАНИЯ ЛЕКАРСТВ

А.И. Хлебников

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, aikhl@tpu.ru

Рассматриваются современные подходы к моделированию взаимодействия между молекулами биологически активных веществ и биомолекулами (рецепторами), а также методы построения соотношений «структура – биологическая активность». Анализируются источники информации о пространственном строении рецепторов и ферментов, возможности молекуляр-

ного докинга и виртуального скрининга. Особое внимание уделено методам фармакофорного моделирования, применяемым в ситуациях, когда структура биомолекулы неизвестна.

Приводится ряд примеров успешного применения вычислительных подходов для создания новых лекарственных препаратов с различными видами биологической активности.

СИНТЕЗ НОВЫХ АЦИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГЛИКОЛУРИЛА

Т.С. Абайдильдин¹, Б.М. Жаппасова¹, А.С. Олжабаева¹, С.Ю. Панышина²
Научный руководитель – д.х.н., профессор Л.К. Салькеева¹; к.х.н., доцент Е.А. Мамаева²

¹Карагандинский государственный университет
100028, Казахстан, г. Караганда, ул. Университетская 28, electrochemistry99@mail.ru

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, elena2009mamaeva@yandex.ru

В настоящее время исследование свойств, а также синтез производных гликолурила (I), являющегося представителем класса бициклических бисмочевин, остаются одним из интенсивно развивающихся областей современной химии гетероциклических соединений. Бициклические мочевины активно используются в различных отраслях промышленности: так смолы, имеющие в своем составе гликолурил, используются для изготовления красок и покрытий; в целлюлозно-бумажной промышленности, благодаря применению гликолурила, удастся избежать образованию слизи; известно использование гликолурила, как промежуточного продукта в синтезе антиоксидантов, моющих, дезинфици-

рующих и отбеливающих средств [1–3].

Известно, что N-замещенные гликолурилы обладают широким спектром биологической активности. Ранее в литературе сообщалось, нейрорепрессивной, антидепрессивной и психостимулирующей активности гликолурила и его производных [3]. Это свойство является основополагающим фактором, вызывающим огромный интерес в исследовании синтезов новой группы соединений, способных к проявлению разнообразных видов активности.

С целью расширения возможностей реакций N-ацилирования гликолурила (I), нами впервые исследовано взаимодействие последнего с 1-бромацетилбромидом.

