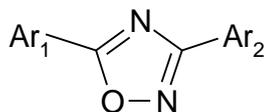


ОЦЕНКА АКТИВНОСТИ РЯДА ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАДИАЗОЛОВ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫХ ПРЕПАРАТОВ.

И.Г. Цыганкова, С.М. Женодарова

Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН

В борьбе с онкологическими заболеваниями разработка более эффективных лекарственных препаратов по-прежнему актуальна, несмотря на многолетние усилия исследователей. Одним из направлений получения новых средств для лечения рака является поиск соединений, способных индуцировать апоптоз – процесс запрограммированной гибели клеток, нарушенный в опухоли. Механизмы индукции апоптоза сложны и ещё детально не изучены, и поэтому применение именно QSAR методов помогает в конструировании перспективных соединений. В настоящей работе корреляционное соотношение структура – свойство на основе фрагментных дескрипторов молекулярной структуры использовано для расчета апоптоз-индуцирующей активности 3,5 – диарил – 1,2,4 – оксадиазолов:



Получена коллекция близких по точности корреляционных моделей с разным числом переменных. Выбор фрагментов и методы отбора переменных в пространстве молекулярных дескрипторов существенно влияют на возможность построения прогноза на основе полученных моделей. Анализ роли тех или иных фрагментов в моделях коллекции позволил предложить новые соединения с высокой активностью в рамках того же химического класса, что может оказаться полезным для создания противоопухолевых препаратов.