



СТРУКТУРНЫЙ ПРОФИЛЬ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АДЕНОЗИНА В КАЧЕСТВЕ АНТИАГРЕГАНТОВ НА ОСНОВАНИИ АНАЛИЗА 3D-QSAR С ПОМОЩЬЮ АЛГОРИТМОВ CoMFA, CoMSIA И SOMFA¹

© 2020 Shunlai Li*, XueFeng Bao*, Chenghu Lu*,
Chaorui Ren*, Guocheng Liu*, and Hongguang Du*, #

*College of Science, Beijing University of Chemical Technology, Chaoyang District, Beijing, 100029 China

Поступила в редакцию 11.06.2019 г.

После доработки 23.08.2019 г.

Принята к публикации 29.12.2019 г.

В работе серия новых производных аденозина исследована с помощью методов сравнительного анализа молекулярных полей (comparative molecular field analysis, CoMFA), сравнительного анализа индексов молекулярного подобия (comparative molecular similarity indices analysis, CoMSIA) и анализа самоорганизующихся молекулярных полей (self-organizing molecular field analysis, SOMFA). Получены статистически значимые коэффициенты (CoMFA, $q^2 = 0.560$, $r^2 = 0.940$, F value = 71.850 и SEE = 0.097; CoMSIA, $q^2 = 0.528$, $r^2 = 0.943$, F value = 29.29 и SEE = 0.108; SOMFA, $r^2 = 0.615$, $r_{cv}^2 = 0.577$, F value = 60.797 и SEE = 0.226), а созданные модели опробованы на тестовых выборках. Тщательный анализ контурных карт позволит разработать новые производные аденозина с высокой эффективностью ингибирования агрегации тромбоцитов для будущего синтеза и исследований.

Ключевые слова: производные аденозина, дизайн, антиагрегантная активность, 3D-QSAR, CoMFA

DOI: 10.31857/S0132342320030173

¹ Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

Автор для связи: (тел.: +86 (106) 443-92-18; эл. почта: dhg@mail.buct.edu.cn).