

БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ВТОРИЧНЫХ АМИНОВ НА ОСНОВЕ АМИНОКИСЛОТ ПО ДАННЫМ ПРОГРАММЫ PASS ONLINE

К. С. Новикова

Ивановский государственный университет

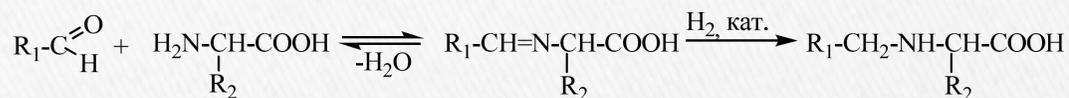


Синтез и скрининг потенциальных биологически активных веществ долг и трудоемок. Поэтому компьютерное прогнозирование спектра биологической активности соединений на сегодняшний день остается актуальным и востребованным.

Современное здравоохранение использует ряд лекарственных средств и препаратов, созданных на основе аминокислот. В связи с этим целью работы является компьютерное прогнозирование спектра биологической активности вторичных аминов на основе аминокислот с помощью программы PASS Online.

В качестве объектов исследования были выбраны вторичные амины, образованные на основе альдегидов: пропаналь, гептаналь, октаналь, изомаляный альдегид, 3-метилбутаналь, 2-этилбутаналь, 2-метилпентаналь, фурфурол, и аминокислот: аланин, валин, изолейцин, аргинин. Эти вторичные амины могут быть в дальнейшем получены по реакции восстановительного аминирования (схема).

Реакция восстановительного аминирования



$R_1 = -\text{CH}_2\text{CH}_3, -(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3, -(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3, -\text{CH}(\text{CH}_3)_2, -\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2, -\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_2,$

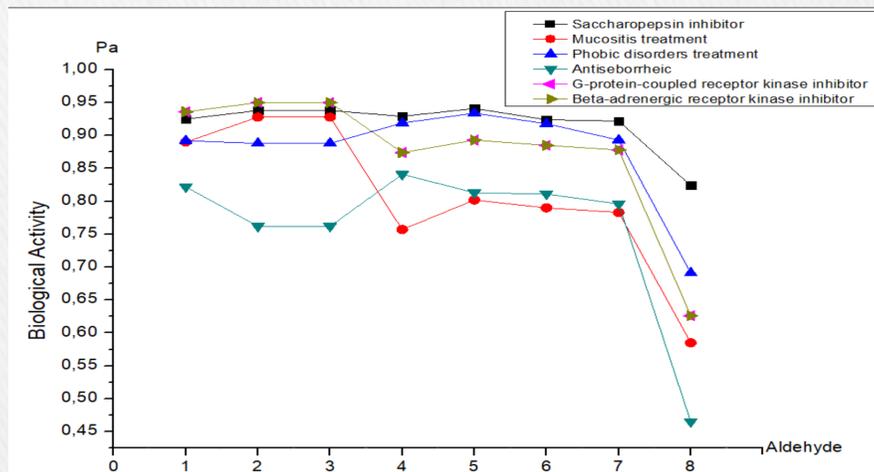
$-\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3, -\text{C}_5\text{H}_4\text{O};$

$R_2 = -\text{CH}_3, -\text{CH}(\text{CH}_3)_2, -\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3, -(\text{CH}_2)_3\text{NHC}(\text{NH}_2)=\text{NH}.$

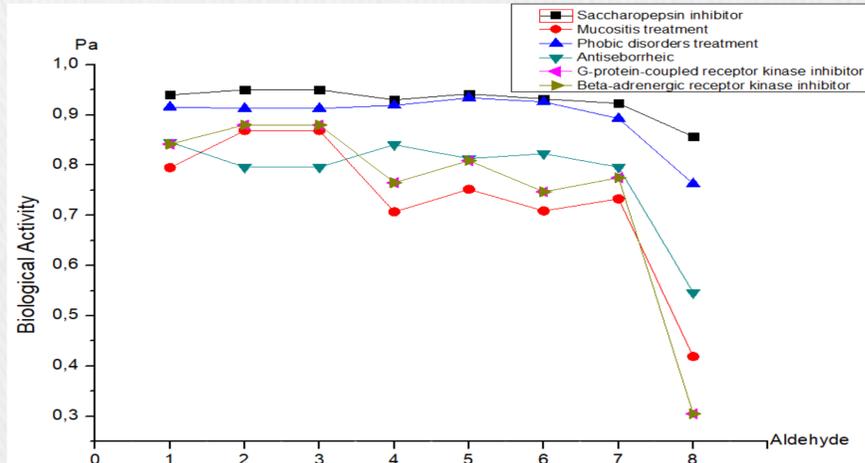
На графиках цифрами по оси X указаны альдегиды:

- | | |
|-------------------------|----------------------|
| 1 – пропаналь | 5 – 3-метилбутаналь |
| 2 – гептаналь | 6 – 2-этилбутаналь |
| 3 – октаналь | 7 – 2-метилпентаналь |
| 4 – изомаляный альдегид | 8 – фурфурол |

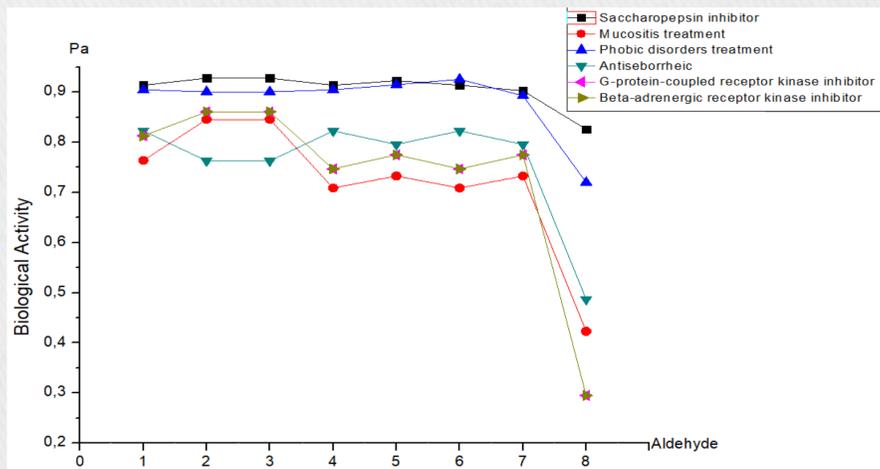
На графике изображена биологическая активность вторичных аминов на основе АЛАНИНА



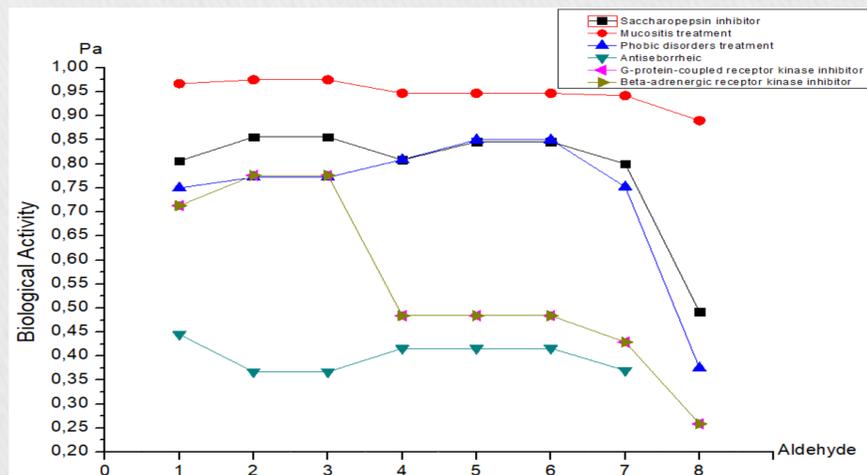
На графике изображена биологическая активность вторичных аминов на основе ВАЛИНА



На графике изображена биологическая активность вторичных аминов на основе ИЗОЛЕЙЦИНА



На графике изображена биологическая активность вторичных аминов на основе АРГИНИНА



Согласно полученным результатам исследуемые соединения могут проявлять широкий спектр потенциальной биологической активности $Pa > 05$: Saccharopepsin inhibitor, Mucositis treatment, Phobic disorders treatment, Antiseborrheic, G-protein-coupled receptor kinase inhibitor, Beta-adrenergic receptor kinase inhibitor, что наряду с отсутствием цитотоксичности делает их перспективными для дальнейшего биологического тестирования.

Научный руководитель: канд. хим. наук, доц. Н.А. Магдалинова