

УДК 547.853.3

Мещерякова Светлана Алексеевна, д.фарм.н., профессор,
Башкирский государственный медицинский университет, г. Уфа
Meshcheryakova Svetlana Alekseevna, Bashkir State Medical University, Ufa

Виноградова Юлия Игоревна, аспирант,
Башкирский государственный медицинский университет, г. Уфа
Vinogradova Yulia Igorevna, Bashkir State Medical University, Ufa

Шумадалова Алина Викторовна, к.фарм.н.,
Башкирский государственный медицинский университет, г. Уфа
Shumadalova Alina Viktorovna, Bashkir State Medical University, Ufa

Хузин Динислам Радикович, ассистент,
Башкирский государственный медицинский университет, г. Уфа
Khuzin Dinislam Radikovich, Bashkir State Medical University, Ufa

**ПРОГНОЗ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ 6-АМИНОЗАМЕЩЕННЫХ
ПРОИЗВОДНЫХ ТИЕТАНИЛУРАЦИЛА В ПРОГРАММЕ PASS-ONLINE
FORECAST OF BIOLOGICAL ACTIVITY OF 6-AMINO SUBSTITUTED
THIETANYLURACIL DERIVATIVES IN THE PASS- ONLINE PROGRAM**

Аннотация: проведен скрининг биологической активности 6-аминозамещенных производных тиетанилурацила с помощью программного пакета PASS с целью выявления их фармакологических свойств.

Abstract: the biological activity of 6-amino-substituted thietanyluracil derivatives was screened using the PASS software package in order to identify their pharmacological value.

Ключевые слова: компьютерный скрининг, биологическая активность, дескриптор, PASS, производные тиетанилурацила.

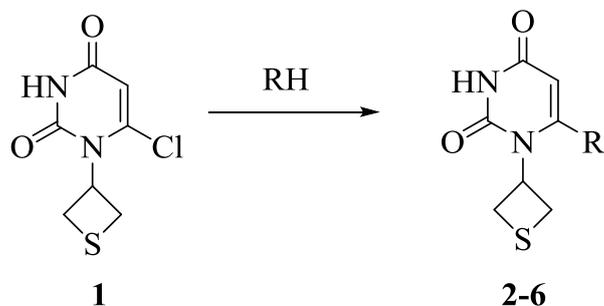
Keywords: computer screening, biological activity, descriptor, PASS, thietanyluracil derivatives.

Ежегодно синтезируется множество новых соединений с различными видами биологической активности, однако для дальнейших медико-биологических исследований могут быть отобраны далеко не все из них. Многие соединения оказываются неперспективными в силу высокой токсичности, тератогенности, мутагенности, плохой растворимости, большого количества побочных эффектов и других причин.

В настоящее время используется компьютерное прогнозирование фармакологических свойств новых соединений, которое можно осуществить с помощью программы PASS [1].

Программа PASS способна прогнозировать спектр биологической активности химических соединений благодаря взаимосвязи между структурой и биологической активностью. Структура соединения описывается его отдельными функциональными элементами (дескрипторами) – радикалами, функциональными группами атомов. Исходя из строения вещества, программа PASS описывает спектр его потенциальной биологической активности.

С целью выявления потенциальных биологически активных веществ нами были синтезированы 6-аминозамещенные производные тиетанилурацила и выполнены расчеты с использованием программы PASS-Online. Схема синтеза представлена на рисунке 1.



R= NH-NH₂ (2); NH-NH-C₆H₅ (3); N-(C₂H₅)₂ (4); N-(C₂H₄OH)₂ (5); NH (6).

Рисунок 1

Прогноз биологической активности синтезированных соединений в программе PASS представляет перечень возможных активностей с указанием вероятности наличия активности (Pa) и вероятности отсутствия активности (Pi). Было выявлено, что следующие соединения, возможно, проявляют биологическую активность с высокой вероятностью.

Соединение 2

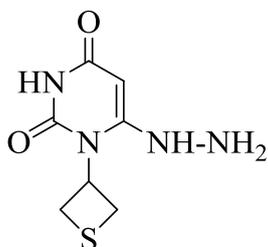


Рисунок 2

- 1) Pa = 0.825 Ингибитор бета-лизин-5,6-аминомутазы
- 2) Pa = 0.771 CDK9 (циклинзависимая киназа 9)/ ингибитор циклина T1
- 3) Pa = 0.755 Ингибитор нуклеозидоксидазы (H₂O₂- образующей)

Соединение 3

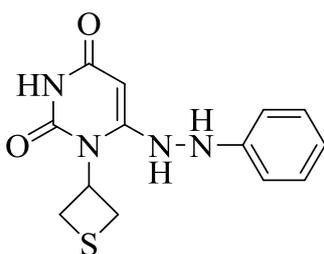


Рисунок 3

- 1) Pa = 0.710 Ингибитор маннотетраозы 2-альфа-N-ацетилглюкозаминилтрансферазы

Соединение 4

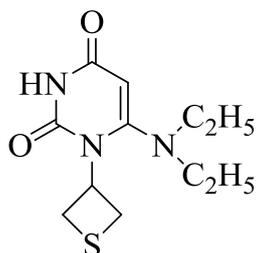


Рисунок 4

1) $P_a = 0.735$ Ингибитор маннотетраозы 2-альфа-N-ацетилглюкозаминилтрансферазы
Соединение 5

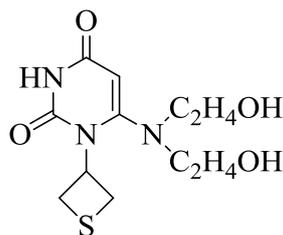


Рисунок 5

1) $P_a = 0.833$ Ингибитор маннотетраозы 2-альфа-N-ацетилглюкозаминилтрансферазы
2) $P_a = 0.752$ Стимулятор лейкопоэза

Соединение 6

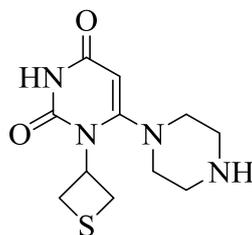


Рисунок 6

1) $P_a = 0.724$ Ингибитор маннотетраозы 2-альфа-N-ацетилглюкозаминилтрансферазы
Таким образом, проведены расчеты биологической активности 6-аминозамещенных производных тиагиданурацила, найдены перспективные для дальнейшего исследования соединения.

Список литературы:

1. Predictive services PASS online [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.pharmaexpert.ru/PASSOnline/index.php>, свободный. – (дата обращения: 03.03.2021).

Ф И П И ЭКОНОМИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 338.242

Дьякова Оксана Валерьевна, к.э.н., доцент,
Донской государственной технической университет, г. Ростов-на-Дону
Dyakova Oksana Valerievna, Don state technical University, Rostov-on-Don

Александрия Анна Валерьевна, преподаватель,
Донской государственной технической университет, г. Ростов-на-Дону
Alexandria Anna Valerievna, Don state technical University, Rostov-on-Don

Оторьян Светлана Аркадьевна,
Донской государственной технической университет, г. Ростов-на-Дону
Otyaryan Svetlana Arkadevna, Don state technical University, Rostov-on-Don

**АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ЗАТРАТАМИ
НА СТРОИТЕЛЬНОМ ПРЕДПРИЯТИИ В СОВРЕМЕННЫХ УСЛОВИЯХ
ACTUAL PROBLEMS OF COST MANAGEMENT
AT A CONSTRUCTION ENTERPRISE IN MODERN CONDITIONS**