

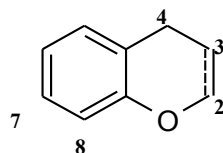
ОЦЕНКА АКТИВНОСТИ ИНДУКТОРОВ АПОПТОЗА ИЗ РЯДА ПРОИЗВОДНЫХ ХРОМЕНА

Цыганкова И.Г., Женодарова С.М.

Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН
Россия, 142290, г. Пущино Московской обл., ул. Институтская, 3

E-mail: tsygan@iteb.ru

Соединения - индукторы апоптоза могут быть использованы как стартовые соединения в дизайне новых противоопухолевых препаратов. Производные хромена:



с заместителями во 2, 3, 4, 7 и 8 положениях проявляют высокую апоптозиндуцирующую активность, что позволяет считать их перспективными для создания лекарственных препаратов. Корреляционные соотношения структура-активность, построенные на основе фрагментных дескрипторов молекулярной структуры, позволили получить модели, оценивающие активность производных хромена с хорошей точностью, и проанализировать элементы структуры благоприятные и неблагоприятные для повышения активности.