

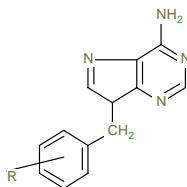
КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ СОЕДИНЕНИЙ РЯДА 9-БЕНЗИЛАДЕНИНОВ, ИНГИБИТОРОВ АДЕНОЗИНДИАМИНАЗЫ

Наумова О.О., Щука Т.В.

Приднестровский государственный университет, Тирасполь

В последнее время для человечества особенно острой стала проблема целенаправленного поиска и синтеза химических веществ, обладающих тем или иным видом биологической активности. Сегодня наличие зависимости свойств, в том числе и биологической активности, от строения соединения (вещества) является несомненным. С этой целью нами был выполнен конформационный анализ соединений ряда 9-бензиладенинов [1], который является первым этапом в исследовании связи структура – активность на базе электронно-топологического подхода и построения системы прогнозирования данной активности. Электронно-топологический подход [3] позволяет сформировать систему прогнозирования требуемого вида биологической активности, провести скрининг соединений и дать рекомендации по направленному синтезу соединения, обладающего требуемой активностью.

Исследуемый ряд включает в себя 17 соединений, отличающихся радикалом (R) и его расположением в бензольном кольце. Общая структурная формула ряда имеет вид:



Все соединения представленного ряда обладают аденозиндиаминазной ингибиторной активностью. Из 17 соединений изученного ряда 10 можно отнести к неактивным и 7 к активным соединениям. Оптимизация геометрии [2] соединений ряда производилась с помощью пакета программ PC Model 4.0. В результате для каждой молекулы ряда были получены значения по полной энергии молекулы, энергии связи, стерической энергии, торсионной энергии, энергии Ван-дер-ваальсовых взаимодействий, дипольному моменту и др.

При сравнении полученных в результате расчетов энергий молекул было выявлено, что молекулы активных соединений отличаются большим значением энергий, чем молекулы неактивных. Сравнение торсионных энергий соединений данного ряда показало увеличение этого параметра у активных соединений по сравнению с неактивными, что говорит о более четкой фиксации структуры активных молекул в пространстве. Также было определено, что величины дипольных моментов ак-

тивных соединений в основном в 10 раз превосходят величины неактивных соединений.

1. Gupta S.P., QSAR studies of enzyme in inhibitors, Chem.Rev., 1987, V.87, №5, P.1183-1253.
2. Дашевский В.Г., Конформационный анализ макромолекул, М.: Наука, 1988.
3. Димогло А.С., Швец Н.М.,// Хим. фарм. ж., 1985, №4, С.438-444.

ПОЛИМЕРАНАЛОГИЧНЫЕ РЕАКЦИИ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИМЕРОВ С ГАЛОГЕНАЛКАНАМИ

Мидякова Т.Н., Воронцова Т.А., Подковырина Т.А.

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола

Одним из перспективных путей создания анионообменников для ионной хроматографии является модифицирование гидрофобизованных силикагелей полиэлектролитными комплексами, образующимися в результате гетерогенного взаимодействия анионоактивного вещества и поликатиона с четвертичными атомами азота. Для синтеза поликатионов с целью изучения полиэлектролитных сорбентов нами проведено исследование полимераналогичных реакций меламиноформальдегидных (I-а, I-б), 2-амино- 4,5-дигидрокси- 1,3- диазиноформальдегидных (II-а, II-б) и 4-амино -1,2,4-триазолоформальдегидного (III) полимеров с галогеналканами (RX). Образцы I-а и I-б, а также II-а и II-б отличались друг от друга средней молекулярной массой, о чем свидетельствуют значения их характеристической вязкости, полученные на основе вискозиметрических измерений ($[\eta]_6 > [\eta]_a$). За процессами взаимодействия I-а, I-б, II-а, II-б, III с RX (кроме иодпроизводных) следили титриметрическим методом (аргентометрия), определяя процентное содержание четвертичного азота в пробах реакционной массы. При достижении им постоянного значения реакцию завершали. Ее продолжительность оказалась зависимой только от природы полимера, оставаясь практически постоянной для различных галогеналканов. Окончательный вывод о массовой доле четвертичного азота в продуктах реакции делали на основе гравиметрических измерений:

RX	Массовая доля четвертичного азота в продукте реакции, %				
	I-а	I-б	II-а	II-б	III
CH ₃ I	29,0	26,5	—	—	5,4
C ₂ H ₅ Br	11,2	12,5	17,1	37,3	3,3
C ₂ H ₅ I	16,5	25,2	—	—	6,1
n-C ₄ H ₉ Br	15,7	33,8	27,3	43,6	4,2
t-C ₄ H ₉ I	59,5	50,6	—	—	8,1