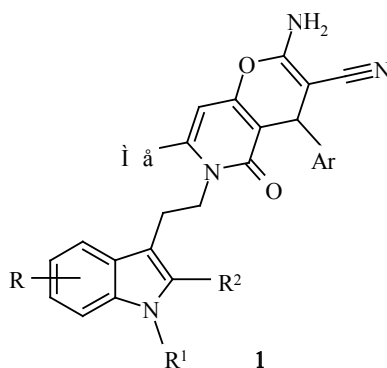


МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ
ТРИПТАМИНОВ

Пржевальский Н.М., Токмаков Г.П., Лайпанов Р.К., Вершинкин Д.А.

Российский государственный аграрный университет-МСХА
имени К. А. Тимирязева, 127550, Москва, Тимирязевская ул., 49
e-mail: prjevalski@mail.ru

Продолжая исследования по синтезу биологически активных гетероциклических соединений,¹⁻³ мы использовали триптамины, синтезированные реакцией Грандберга,⁴ для получения новых производных пиранопиридонов 1 с потенциальной цитотоксической активностью. Данные рентгеноструктурного анализа соединений 1a (R, R¹, R²=H, Ar=C₆H₅) и 1б (R, R¹=H, R²=Me, Ar=C₆H₅) и известная пространственная структура модельного противоопухолевого препарата камптотецина в активной конформации в комплексе с топоизомеразой и ДНК⁵ позволили провести докинг веществ 1 по программе AutoDock Vina.



1 R=H, галоген, алкил; R¹=H, CH₂, Ph; R²=H, Me; Ar= Ph, замещённый Ph, Нет

Полученные результаты показали, что все целевые соединения могут проявлять антипролиферативную активность.

Литература

1. Magedov I.V., Manpadi M., Van Slambrouck S., Steelant W.F.A., Rozhkova E., Przheval'skii N.M., Rogelj S., Kornienko A. J. Med. Chem., 2007, 50, 5183.
2. Пржевальский Н. М., Лайпанов Р.К., Токмаков Г.П., Рожкова Е. Н. Известия ТСХА, 2015, 6, 67.
3. Пржевальский Н. М., Лайпанов Р.К., Токмаков Г.П., Рожкова Е. Н. там же, 2017, 3, 146.
4. Пржевальский Н. М., Лайпанов Р.К., Токмаков Г.П., Нам Н.Л. Известия Академии наук. Серия химическая, 2016, 7, 1709.
5. Staker B.L., Feese M.D., Cushman M., et.al. J. Med. Chem., 2005, 48, 2336.