



## СТРУКТУРНЫЙ ПРОФИЛЬ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АДЕНОЗИНА В КАЧЕСТВЕ АНТИАГРЕГАНТОВ НА ОСНОВАНИИ АНАЛИЗА 3D-QSAR С ПОМОЩЬЮ АЛГОРИТМОВ CoMFA, CoMSIA И SOMFA<sup>1</sup>

© 2020 Shunlai Li\*, XueFeng Bao\*, Chenghu Lu\*,  
Chaorui Ren\*, Guocheng Liu\*, and Hongguang Du\*<sup>#</sup>

\*College of Science, Beijing University of Chemical Technology, Chaoyang District, Beijing, 100029 China

Поступила в редакцию 11.06.2019 г.

После доработки 23.08.2019 г.

Принята к публикации 29.12.2019 г.

В работе серия новых производных аденозина исследована с помощью методов сравнительного анализа молекулярных полей (comparative molecular field analysis, CoMFA), сравнительного анализа индексов молекулярного подобия (comparative molecular similarity indices analysis, CoMSIA) и анализа самоорганизующихся молекулярных полей (self-organizing molecular field analysis, SOMFA). Получены статистически значимые коэффициенты (CoMFA,  $q^2 = 0.560$ ,  $r^2 = 0.940$ ,  $F$  value = 71.850 и  $SEE = 0.097$ ; CoMSIA,  $q^2 = 0.528$ ,  $r^2 = 0.943$ ,  $F$  value = 29.29 и  $SEE = 0.108$ ; SOMFA,  $r^2 = 0.615$ ,  $r_{cv}^2 = 0.577$ ,  $F$  value = 60.797 и  $SEE = 0.226$ ), а созданные модели опробованы на тестовых выборках. Тщательный анализ контурных карт позволит разработать новые производные аденозина с высокой эффективностью ингибирования агрегации тромбоцитов для будущего синтеза и исследований.

*Ключевые слова:* производные аденозина, дизайн, антиагрегантная активность, 3D-QSAR, CoMFA

DOI: 10.31857/S0132342320030173

<sup>1</sup> Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

<sup>#</sup> Автор для связи: (тел.: +86 (106) 443-92-18; эл. почта: dhg@mail.buct.edu.cn).