

РАСЧЕТ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ В ПРОГРАММЕ PASS ONLINE

Иванова В.А.^а, Попова Л.М.^а, Лебедев Н.В.^б

^аСанкт-Петербургский Государственный Университет Промышленных Технологий
и Дизайна (Высшая Школа Технологии и Энергетики)
198095, Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, д. 4,
e-mail: varya2306@yandex.ru

^бНИИ синтетического каучука им. академика С.В. Лебедева,
198035, Санкт-Петербург, ул. Гапсальская, д. 1

Производные 4-хиназолинона являются перспективными фармакологическими препаратами, обладающие широким спектром биологической активности¹.

Данные о биологической активности синтезированных нами соединений по модифицированным методикам^{1,2} получены с помощью программы PASS online³ и приведены в табл.

Таблица. Биологическая активность

Активность	Вероятность быть активным (P _a)		
	1,4-бис-(2,2'-хиназолинонил)бензол	бис-(2,2'-карбамоилфенил)имин терефталальдегида	ди(трифторметил)-бис-[(2,2'-хиназолинонил)-4,4'-фенил]метан
Стимулятор функции почек	0.679	0.541	0.522
Лечение фобий	0.671	0.775	0.467
Антиишемическая	0.618	-	0.458
Лечение алопеции	0.490	0.510	0.333
Противоопухолевая	0.489	0.358	0.198
Лечение инсульта	0.447	-	0.297
Лечение мышечной дистрофии	0.434	0.500	0.301

Вероятность отсутствия активности для всех соединений находится в диапазоне $0.001 < P_i < 0.090$. Ди(трифторметил)-бис-[(2,2'-хиназолинонил)-4,4'-фенил]метан может обладать антигистаминным и антиастматическим действием (P_a 0.974 и 0.980 соответственно), однако введение в молекулу трифторметильных групп уменьшает другие виды активности.

Литература:

1. Wei H., Zhou L. et al. Toxicological & Environmental Chemistry, 2015, 97, 1.
2. Lee V.R. Patent 5686560 USA, 1997.
3. PASS Online. <http://way2drug.com/passonline>.