

ВАСИЛЬЕВ М.Н., ГЕРЧИКОВ А.Я., ХАЙРУЛЛИНА В.Р., ЗИГАНГИРОВ А.С., ЗАРУДИЙ Ф.С.  
ФГБОУ ВО БашГУ; ФГБОУ ВПО БГМУ, Уфа, Россия

### **QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ВЫРАЖЕННОЙ НООТРОПНОЙ АКТИВНОСТЬЮ**

**Цель:** построение QSAR-моделей для изучения взаимосвязи «структура-свойство» в ряду органических соединений с выраженной ингибирующей активностью в отношении ацетилхолинэстеразы (АХЭ).

**Материалы и методы:** исследования проводились с использованием программы GUSAR (General Unrestricted Structure Activity Relationships), которая для описания структур соединений использует два типа атомцентрических дескрипторов: подструктурные – MNA (Multilevel Neighbourhoods of Atoms) и электро-топологические – QNA (Quantitative Neighbourhoods of Atoms), а в качестве математического алгоритма – самосогласованную регрессию. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (проект №4. 299. 2014/К) и РФФИ (грант 14-04-97035).

**Результаты:** с использованием программы GUSAR на базе шести обучающих и двух тестовых выборок проведено моделирование количественной взаимосвязи между строением и эффективностью ингибирующего действия производных 3,8-дiazобикаклооктана в отношении АХЭ. В рамках используемой программы на базе MNA- и QNA-дескрипторов, а также их сочетания, построено шесть консенсус QSAR-моделей прогноза численных значений  $IC_{50}$  для моделируемых соединений. Каждая из этих консенсус-моделей включает в себя 320 частных QSAR-уравнений. Все регрессионные зависимости являются устойчивыми:  $R^2 > 0,6$ ;  $Q^2 > 0,5$ .

**Выводы:** построено шесть устойчивых статистически значимых консенсус-QSAR-моделей прогноза численных значений  $IC_{50}$  для производных 3,8-дiazобикаклооктана в отношении АХЭ.