Содержание

ОГЛАВЛЕНИЕ

Список используемых сокращений...4

ВВЕДЕНИЕ...5

Глава 1 АНАЛИЗ СВЯЗИ СТРУКТУРА-ГЕПАТОЗАЩИТНАЯ АКТИВНОСТЬ КАК ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОСНОВА ОТБОРА ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ СОЗДАНИЯ НОВЫХ ГЕПАТОЗА-ЩИТНЫХ СРЕДСТВ (Литературный обзор)...11

1.1. Проблема поиска гепатозащитных средств...11

1.2. Современные подходы к поиску веществ с заданным биологиче-

ским действием...14

1.3. Информация о зависимости гепатозащитного действия соединений от их структуры...22

Глава 2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ...26

2.1. Экспериментальное тестирование гепатозащитной активности..26

2.2. Молекулярные дескрипторы...28

2.3. Математические методы, использованные для анализа связи

структура-гепатозащитная активность...38

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ Глава 3. ЗАВИСИМОСТЬ ГЕПАТОПРОТЕКТОРНОГО ДЕТОКСИ-ЦИРУЮЩЕГО ДЕЙСТВИЯ ПРОИЗВОДНЫХ АДАМАНТАНА ОТ СТРУКТУРЫ...44

3.1. Биологическая активность производных адамантана...44

3.2. Применение топологических дескрипторов...51

3.3. Применение автокорреляционных, подструктурных и 3D-дескрипторов...54

3.4. Применение квантовохимических дескрипторов...60

3

Глава 4. ЗАВИСИМОСТЬ ГЕПАТОПРОТЕКТОРНОГО ДЕТОКСИ-ЦИРУЮЩЕГО ДЕЙСТВИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ИНДОЛА ОТ СТРУКТУРЫ...64

4.1. Введение...64

4.2. Применение подструктурных дескрипторов...64

4.3. Применение 3D-дескрипторов...72

4.4. Применение топологических и автокорреляционных дескрипторов ...76

4.5. Применение квантовохимических дескрипторов...78

Глава 5. ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ ПРИ КЛАССИФИКАЦИИ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ПО АКТИВНОСТИ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ДЕСКРИПТОРОВ...82

Глава 6. ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ МЕЖДУ СТРУКТУРОЙ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И ГЕПАТОПРОТЕКТОРНОЙ АКТИВНОСТЬЮ, ПОВЫШАЮЩЕЙ РЕПАРАТИВНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ПЕЧЕНИ...90

ЗАКЛЮЧЕНИЕ...94

ВЫВОДЫ...96

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ...98