

Статья публикуется по материалам доклада на Научно-практической конференции “Новые химико-фармацевтические технологии”, состоявшейся 28 мая 2014 г. в РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>

УДК 54.057:547.96:615.273.5. Поступила в редакцию 26 июня 2014 г.

Тематическое направление: Пептидные ингибиторы агрегации тромбоцитов. Часть 1.

Разработка новых антиагрегационных гетеромерных пептидов с имидазо[4,5-е]бензо[1,2-с;3,4-с']дифуроксановым фрагментом

© Алексеев^{1*} Алексей Анатольевич, Брылев^{1*+} Максим Игоревич,
Королев¹ Вячеслав Леонидович, Лоторев¹ Дмитрий Сергеевич,
Лизунов² Антон Юрьевич, Зайцева¹ Наталья Ивановна,
Павлова^{1*} Людмила Анатольевна, Ившин³ Виктор Павлович
и Домашева⁴ Ольга Юрьевна

¹ Лаборатория биологически активных соединений НИИ фармации. Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова. Ул. Трубецкая, д.8, стр.2. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (495) 708-39-71. E-mail: alexeevalexei1991@mail.ru.

² Кафедра высшей математики. Московский физико-технический институт (государственный университет). Ул. Керченская, д.1А, корпус 1. г. Москва, 117303. Россия. Тел.: (495) 408-45-54.

³ ГБОУ ВПО Марийский государственный университет. Пл. Ленина, д.1. г. Йошкар-Ола, 424000. Россия.

⁴ Курский государственный университет. Ул. Радищева, д.33. г. Курск, 305000. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: GР IIb/IIIa рецепторы тромбоцитов, ингибирование агрегации тромбоцитов, компьютерное моделирование, имидазо[4,5-е]бензо[1,2-с;3,4-с']дифуроксаны, гетеромерные пептиды.

Аннотация

С применением программы *Алгокомб* выполнено математическое моделирование гетеромерных пептидов, включающих имидазо[4,5-е]бензо[1,2-с;3,4-с']дифуроксанный фрагмент и подтверждена эффективность их связывания с GР IIb/IIIa-рецепторами тромбоцитов. Сгенерированные соединения были синтезированы в условиях автоматического пептидного синтезатора *Applied Biosystems 433A* с использованием Fmoc-стратегии. Оценка антиагрегационной активности смоделированных гетеромерных пептидов показала наличие доз-зависимого ингибирования АДФ-индуцированной агрегации тромбоцитов.