

## **Использование SAR и QSAR-методологии для прогнозирования свойств супертоксикантов. Программный комплекс COMSAT для установления количественных соотношений структура-активность органических соединений, проявляющих субстратную специфичность к семейству CYP450 человека.**

© Полушин Роман Викторович\* и Ившин Виктор Павлович<sup>†</sup>

*Кафедра органической химии и биологической химии. Биолого-химический факультет.  
Марийский государственный университет. Пл. Ленина, 1, корпус А. г. Йошкар-Ола, 424001. Россия.  
Тел.: (8362) 42-32-79. E-mail: [organic@marsu.ru](mailto:organic@marsu.ru)*

\*Ведущий направление; <sup>†</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** QSAR, молекулярные дескрипторы, цитохром P450, диоксиноподобные супертоксиканты.

### **Аннотация**

В настоящей работе предложена методология для решения задачи прогнозирования структура-свойство органических соединений, на основе оценки их субстратной специфичности к ферментам семейства P450 и путей деградации, а также построения семейств прогностических QSAR-уравнений с использованием в качестве дескрипторов электронных, физико-химических, топологических и геометрических параметров.