

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 535.34; 539.1.047; 543.42

DOI: 10.17223/00213411/62/4/9

О.К. БАЗЫЛЬ¹, В.Я. АРТЮХОВ¹, Г.В. МАЙЕР¹, Г.Б. ТОЛСТОРОЖЕВ², М.В. БЕЛЬКОВ², О.И. ШАДЫРО³**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗАМЕЩЕНИЯ НА ПРОТИВОВИРУСНУЮ АКТИВНОСТЬ ГИДРОКСИЛЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗАЛЬДЕГИДОВ И РОДСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ***

С использованием волновых функций квантово-химического метода ЧПДП рассчитан молекулярный электростатический потенциал (МЭСП) гидроксилзамещенных бензальдегидов и родственных соединений, проявляющих способность ингибировать размножение вируса герпеса простого I типа. Установлено, что степень биологической активности коррелирует не только с величиной протоноакцепторной способности замещенных, но и с геометрией биологически активных молекул. Установлено соответствие величины МЭСП гидроксильных групп и эффективности ингибирующей способности исследованных замещенных.

Ключевые слова: замещенные бензальдегиды, квантово-химические расчеты биомолекул, молекулярный электростатический потенциал, антивирусная активность.

Введение

Гидроксильированный салициловый альдегид обладает антиинфекционными свойствами [1] и содержит фармакофорные фрагменты, входящие в состав госсипола [2] – природного соединения, обладающего высокой противовирусной активностью при низкой токсичности. В работе [3] описан синтез некоторых замещенных бензальдегидов и приведены их ингибирующие свойства, полученные на культурах клеток с вирусами герпеса простого 1 типа. На рис. 1 приведены структуры исследованных замещенных бензальдегидов. В качестве критерия противовирусного действия авторами [3] выбрана величина снижения титра вируса в присутствии исследованных соединений.

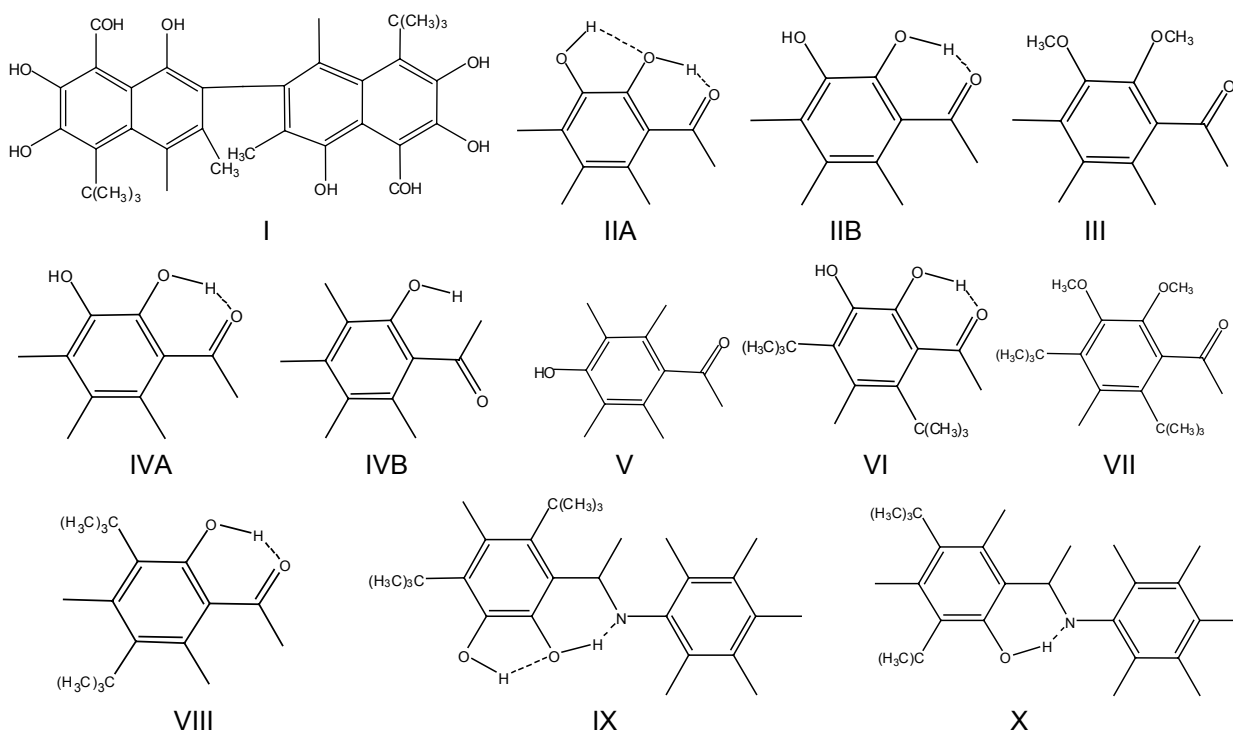


Рис. 1. Структурные формулы исследованных соединений

* Результаты получены в рамках выполнения госзадания Минобрнауки России, проект № 4.6027.2017/8.9.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>