

ВИРТУАЛЬНАЯ БАЗА СТРУКТУР БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МОЛЕКУЛ

Дм.Дм.Васильев

*ООО «АСИНЭКС МедХим»
123182, Москва, Щукинская ул., 6.*

При разработке новых лекарств большие количества (до нескольких десятков) различных химических веществ исследуются на предмет наличия интересующего типа лекарственной активности. При этом используются виртуальные библиотеки фрагментов органических молекул, позволяющих «синтезировать» молекулы, содержащие такие фрагменты. Последнее предполагает обобщение с последующей типологизацией множества химических реакций.

Подобная библиотека разработана фирмой «АСИНЭКС Медхим», занимающейся производством микрообразцов биологически активных веществ и разработкой методик их синтезов. Содержимое коллекции «АСИНЭКС Медхим» отражено в нескольких электронных каталогах, которые доступны на CD-дисках, а также может быть получено через Интернет в online и off-line режимах.

Для создания каталога используется среда MS Access 2000. Графические изображения молекулярных структур создаются при помощи специально предназначенной для работы с химическими виртуальными библиотеками (типа рассмотренной выше) программы ISIS 2.3, выпускаемой фирмой MDL Information Systems, Ltd. В базе отражены химические формулы продаваемых веществ и известных лекарственных аналогов, а также основные параметры, оказывающие влияние на биологическую активность, что существенно облегчает выбор веществ, удовлетворяющих требованиям заказчика и прогноз их воздействий на живые организмы.

VIRTUAL LIBRARY OF BIOLOGICAL ACTIVE MOLECULE STRUCTURES

Dmitry D. Vasyliev

*Science & Developing Centre of Medicinal Biotechnology
AsInEx MedChem, Ltd.
Moscow 123182, Schukinskaya str., 6.*

During drug design the virtual screening of amounts (some decimals roughly) of several organic compounds are researched in the order of the type of biological activity present. Using virtual libraries of organic molecular fragments we can synthesize molecules which containing such fragments as during real process. This process propose generalization and typologization of a number of chemical reactions and rules of several fragments interactions.

AsInEx MedChem Ltd. Company which was founded in 1993 and owning one of largest commercially accessible chemical database. The MS Access 2000 program is used for the creating of catalogue. Using program ISIS 2.3 (MDL Information Systems, Ltd.) graphical images of molecular structures are creating. "Octane" type graphical workstations are using for support of the working with amounts of graphical images. Current base is saving on the server. The network accessible to it realize by standart mean.

Commercial title, chemical formula and values of main parameters which influence biological activity.

Such form of data representation is relieves the compounds selection which satisfy to client's requires by either one or several parameters. If the necessary compound is absent, its analogs may be suggest to client. Their searching in the group of homology compounds is simplified by typologization. Structure formulaes of compounds and their known drug analogs may be possible their biological activities, means of nutrial insertion and passes of treatment optimization.