



(H)	
Li ³ ЛИТИЙ	Be ⁴ БЕРИЛЛИЙ
Na ¹¹ НАТРИЙ	Mg ¹² МАГНИЙ
K ¹⁹ КАЛИЙ	Ca ²⁰ КАЛЬЦИЙ
29 Cu МЕДЬ	30 Zn ЦИНК
Rb ³⁷ РУБИДИЙ	Sr ³⁸ СТРОНЦИЙ
47 Ag СЕРЕБРО	48 Cd КАДМИЙ
Cs ⁵⁵ ЦЕЗИЙ	Ba ⁵⁶ БАРИЙ
79 Au ЗОЛОТО	80 Hg РТУТЬ
Fr ⁸⁷ ФРАНЦИЙ	Ra ⁸⁸ РАДИЙ

ТОМ 53

ВЫП. 5

ISSN 0579-2991

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

СЕРИЯ

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

Иваново 2010

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
ИЗДАНИЕ ИВАНОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

**ХИМИЯ
И
ХИМИЧЕСКАЯ
ТЕХНОЛОГИЯ**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ
Основан в январе 1958 года. Выходит 12 раз в год.

**Том 53
Вып. 5**

Иваново 2010

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор О.И. Койфман (*д.х.н., профессор, член-корр. РАН*)
Зам. гл. редактора В.Н. Пророков (*к.х.н.*)
Зам. гл. редактора В.В. Рыбкин (*д.х.н., профессор*)
Зам. гл. редактора А.П. Самарский (*к.х.н.*)
Зав. редакцией А.С. Манукян (*к.т.н.*)

В.К. Абросимов (*д.х.н., проф.*), М.И. Базанов (*д.х.н., проф.*), Б.Д. Березин (*д.х.н., проф.*),
В.Н. Блиничев (*д.т.н., проф.*), С.П. Бобков (*д.т.н., проф.*), В.А. Бурмистров (*д.х.н., проф.*),
Г.В. Гиричев (*д.х.н., проф.*), О.А. Голубчиков (*д.х.н., проф.*), М.В. Ключев (*д.х.н., проф.*),
А.М. Колкер (*д.х.н., проф.*), А.Н. Лабукин (*д.т.н., проф.*), Т.Н. Ломова (*д.х.н., проф.*),
Л.Н. Мизеровский (*д.х.н., проф.*), В.Е. Мизонов (*д.т.н., проф.*), В.И. Светцов (*д.х.н., проф.*),
Ф.Ю. Телегин (*д.х.н., проф.*), М.В. Улитин (*д.х.н., проф.*), В.А. Шарнин (*д.х.н., проф.*)

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

<i>проф.</i> Дудырев А.С. (г. Санкт-Петербург)	<i>акад. РАН</i> Новоторцев В.М. (г. Москва)
<i>проф.</i> Дьяконов С.Г. (г. Казань)	<i>член-корр. РАН</i> Овчаренко В.И. (г. Новосибирск)
<i>акад. РАН</i> Егоров М.П. (г. Москва)	<i>акад. РАН</i> Саркисов П.Д. (г. Москва)
<i>акад. РАН</i> Еременко И.Л. (г. Москва)	<i>акад. РАН</i> Синяшин О.Г. (г. Казань)
<i>проф.</i> Захаров А.Г. (г. Иваново)	<i>проф.</i> Тимофеев В.С. (г. Москва)
<i>акад. РАН</i> Монаков Ю.Б. (г. Уфа)	<i>член-корр. РААСН</i> Федосов С.В. (г. Иваново)
<i>член-корр. РАН</i> Новаков И.А. (г. Волгоград)	

Издание Ивановского государственного химико-технологического университета, 2010

Адрес редакции: 153000, г. Иваново, пр. Фридриха Энгельса, 7, тел. 8(4932)32-73-07, E-mail: ivkkt@isuct.ru,
<http://CTJ.isuct.ru>

Редакторы: М.В. Виноградова, Н.Ю. Спиридонова
Англ. перевод: В.В. Рыбкин
Компьютерная верстка: А.С. Манукян

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору за соблюдением законодательства
в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-24169 от 20 апреля 2006 г.

Журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук»

Журнал издается при содействии Академии инженерных наук им. А.М. Прохорова

Подписано в печать 12.04.2010. Формат бумаги 60x84 ¹/₈.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 12,6. Усл. кр.-отт. 18,34. Учетно-изд. л. 15,12. Тираж 450 экз. Заказ 557.

Отпечатано с диапозитивов в ОАО «Ивановская областная типография». 153008, г. Иваново, ул. Типографская, 6.

Подписка: ОАО Агентство «РОСПЕЧАТЬ» (подписной индекс 70381),
ООО «Научная электронная библиотека» (www.e-library.ru).

©Изв. вузов. Химия и химическая технология, 2010

С.А. Кирлан, Е.А. Кантор, Т.С. Соломинова, А.М. Колбин

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ТИПА «СТРУКТУРА-ФАРМАКТИВНОСТЬ-ТОКСИЧНОСТЬ»*

(Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Научно-исследовательский институт гербицидов и регуляторов роста с опытно-экспериментальным производством АН РБ)

В обзоре изложены результаты исследований зависимости между строением азот-, окси-, и серу- содержащих гетероциклических соединений, их фармакологической активностью и токсическими свойствами. Представлены следующие перспективные группы лекарственных соединений: ингибиторы митохондриальной ферментной системы, аналоги простагландинов с противовоспалительной и уретонической активностью, антиоксиданты, противовирусные соединения, антигельминтики.



Кирлан

Светлана Анатольевна-

к.х.н., ведущий научный сотрудник ГУ «НИТИГ АН РБ»
Область научных интересов: органическая химия, компьютерная химия, биологически активные вещества, исследование закономерностей связи «структура-свойство», молекулярная модификация.
тел./факс (347) 240-56-16
e-mail: sv55@rambler.ru



Кантор

Евгений Абрамович-

д.х.н., профессор, зав. кафедрой физики ГОУ ВПО УГНТУ
Область научных интересов: органическая химия, квантовая химия, исследование закономерностей связи «структура-свойство», биологически активные вещества.
тел./факс (347) 242-07-18
e-mail: evgkantor@mail.ru



Соломинова

Татьяна Сергеевна-

к.б.х.н., с.н.с., ведущий научный сотрудник ГУ «НИТИГ АН РБ»
Область научных интересов: органическая химия, компьютерная химия, препаративные формы, исследование закономерностей связи «структура-свойство»
тел. (347) 242-83-52
e-mail: labsar@anrb.ru



Колбин

Александр Михайлович-

к.х.н., с.н.с., директор ГУ «НИТИГ АН РБ»
Область научных интересов: органическая химия, препаративные формы, биологически активные вещества, квантовая химия.
e-mail: labsar@anrb.ru

Ключевые слова: гетероциклические соединения, строение, фармакологическая активность, токсические свойства

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время стоимость разработки нового лекарственного препарата может составлять 500-900 млн. долларов [1-3]. Эффективным снижением затрат на поиск новых активных и безопасных соединений является применение методов молекулярного моделирования *in silico* на основе современных прогнозирующих и экспертных систем [4-15]. Особый интерес для поиска новых лекарственных препаратов представляют различные группы гетероциклических соединений. Например, азолы применяются в качестве

таких лекарственных средств, как антигельминтики, ингибиторы и индукторы митохондриальной ферментной системы, бронхолитики, противовирусные препараты, фунгициды [16]. Аналоги простагландинов широко применяются при сердечно-сосудистых, воспалительных заболеваниях, при бронхиальной астме [18, 19]. Актуальна проблема поиска новых низкотоксичных простагландинов с разнообразными типами активности, в частности, с такими, как противовоспалительная и уретоническая. Вещества на базе природных соединений: производные фенола, ксантина, аминов и имидов, про-

* Обзорная статья