ДИЗАЙН И СИНТЕЗ КАРКАСНЫХ АНАЛОГОВ ВИЛДАГЛИПТИНА

М.С. Заборская, В.А. Ширяев, Е.А. Ивлева, Ю.Н. Климошкин

ФГБОУВО, Самарский государственный технический университет,
443100, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244.

DOI: 10.19163/MedChemRussia2021-2021-526

E-mail: dyuldenko.masha@yandex.ru

Одним из наиболее известных соединений, способных ингибировать дипептидилпептидазу-4, является вилдаглиптин. В рамках данной работы синтезированы аминокислоты каркасного строения на основе соединений адамантана, бицикло[3.3.1]нонана и диамантана, которые в дальнейшем могут быть использованы в качестве ключевых структурных блоков в аналогах вилдаглиптина.

Для оценки возможной ингибирующей активности предполагаемых аналогов вилдаглиптина в отношении ДПП-4 был проведён их докинг с использованием программного обеспечения AutoDock Vina. Для оценки адекватности полученных данных сравнение производилось с комплексом ДПП-4 с молекулой вилдаглиптина. Модели лигандов для молекулярного докинга были построены при помощи программного пакета Avogadro 1.2.0. Молекулярный докинг показал, что предполагаемые соединения имеют достаточно большие энергии связывания, которые близки к энергии связывания вилдаглиптина, поэтому для них вероятно проявление биологической активности. В целом, анализ показал, что для увеличения энергии связывания целесообразнее изменить заместители в адамантановом цикле, чем изменять саму структуру цикла.