БИОИЗОСТЕРЫ СЕРТОНИНА: КОНДЕНСИРОВАННЫЕ АЗОЛЫ КАК 5-HT_{2A} И 5-HT₃ АНТАГОНИСТЫ

**Д.С. Яковлев^{1,2}, К.Т. Султанова^{1,2}, Д.В. Мальцев^{1,2}, Я.В. Агацарская^{1,2},
М.В. Черников³, А.С. Морковник⁴, О.Н. Жуковская⁴**

¹Кафедра фармакологии и биоинформатики, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный медицинский университет» Минздрава России, 400131, Россия, г. Волгоград, площадь Павших Борцов, д. 1.

²Лаборатория экспериментальной фармакологии, Государственное бюджетное учреждение «Волгоградский медицинский научный центр», 400131, Россия, г. Волгоград, площадь Павших Борцов, д. 1.

³Кафедра фармакологии с курсом клинической фармакологии,

Пятигорский медико-фармацевтический институт – филиал Волгоградского государственного медицинского университета, 357532, Ставропольский край, г. Пятигорск, пр. Калинина, д.11.

⁴НИИ физической и органической химии, Южный Федеральный университет, 344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 194/2.

DOI: 10.19163/MedChemRussia2021-2021-87

E-mail: dypharm@list.ru

Проведен многоэтапный направленный поиск высокоактивных лигандов серотониновых 2A, 3 рецепторов в рядах более 1500 новых конденсированных азолов: производных индолов, бензимидазолов; пиримидо-, пиразоло-, 2,3-дигидро-, имидазо-, дигидроимидазо[1,2-а]бензимидазолов [1-3]. Выявлены структурно функциональные закономерности, отвечающие за развитие антисеротонинового действия [1] (Рис. 1).

Рис. 1. Интегральные скаффолды, ответственные за развитие высокого (А) 5-HT_{2A}- и (Б) 5-HT₃-антагонистического действия.

Данные об интегральных скаффолдах, реализующих эффекты 5-HT_{2A}, 5-HT₃-антагонистов, а также об уровне указанных видов активности изученных соединений, могут быть использованы для расширения базы данных эталонов при информационных прогнозах соответствующих видов активности у новых, в том числе планируемых к синтезу веществ.

Литература

- [1] Яковлев Д. С. Конденсированные азолы – новый класс лигандов серотониновых рецепторов. Диссертация на соискание ученой степени доктора медицинских наук. Специальность 14.03.06 «Фармакология, клиническая фармакология». – Волгоград, 2016. – 339 с.
- [2] The derivatives of imidazo[1,2-a]benzimidazole as 5-HT_{2A} receptor antagonists / A.A. Spasov, D. S. Yakovlev, D. V. Maltsev [et al.] Russian Journal of Bioorganic Chemistry. – 2016. – Vol. 42. – No 4. – P. 397-403.
- [3] Antiserotonin properties of tricyclic benzimidazole derivatives / A. A. Spasov, M. V. Chernikov, D. S. Yakovlev, V. A. Anisimova Pharmaceutical Chemistry Journal. – 2006. – Vol. 40. – No 11. – P. 603-606.