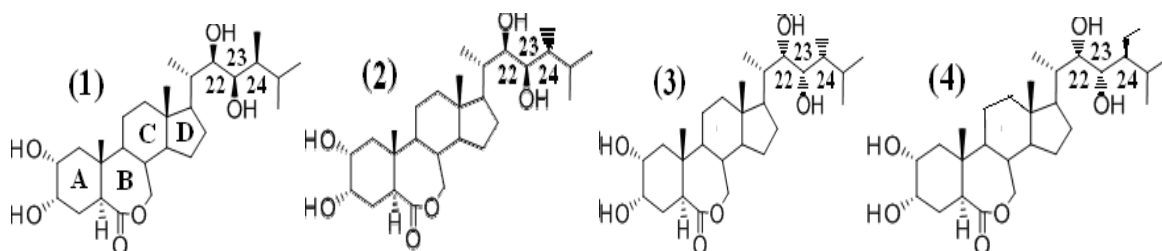


УСТАНОВЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ АСПЕКТОВ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ БРАССИНОСТЕРОИДОВ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Андрианов В.М., Королевич М.В.

*Белорусский государственный аграрный технический университет,
Минск, Беларусь, e-mail: korolevi@dragon.bas-net.by*

Брассиностероиды (БС) – класс растительных фитогормонов, проявляющих высокую биологическую активность. Они известны своей ростостимулирующей способностью, а также рассматриваются как потенциальные антиканцерогенные фармакологические средства. Методами молекулярной механики, квантовой химии в приближении теории DFT и молекулярной динамики проведен конформационный анализ наиболее биологически активного соединения класса БС – природного брассинолида (1) – и менее активных – природного 24-эпибрассинолида (2), синтетических (22S,23S)-24-эпибрассинолида (3) и (22S,23S)-гомобрассинолида (4) с последующим сопоставлением структур их боковых цепей.



Установлено, что конфигурация 22R,23R,24S двух гидроксильных и метильной группы брассинолида обеспечивает структуры боковой цепи, в которых ее диольная система образует внутримолекулярную водородную связь O6...H(O5). При этом гидроксил O6H свободен и может участвовать в формировании межмолекулярных водородных связей с рецептором.

Применение метода молекулярной динамики (МД) с явным заданием свойств растворителя (воды) показало, что для молекулы брассинолида в равновесной смеси доля биологически значимых низкоэнергетических конформеров значительно выше, чем для природной молекулы 24-эпибрассинолида и синтетических молекул (22S,23S)-24-эпибрассинолида и (22S,23S)-гомобрассинолида, что и объясняет ее более высокую биоактивность.