КЛМ

Том 8 №2 2013

УКРАЇНСЬКИЙ ЖУРНАЛ

КЛІНІЧНОЇ ТА ЛАБОРАТОРНОЇ МЕДИЦИНИ

Всеукраїнський науково-медичний журнал
Виходить 4 рази на рік

ГОЛОВНИЙ РЕДАКТОР
В.К.Івченко (Луганськ)

ЗАСТУПНИК ГОЛОВНОГО РЕДАКТОРА
І.О.Комаревцева (Луганськ)

НАУКОВИЙ РЕДАКТОР
Ю.І.Налапко (Луганськ)

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ:
Н.М.Білько (Київ)
О.П.Волосовець (Київ)
О.П.Гудзенко (Луганськ)
Н.К.Казимирко (Луганськ)
Г.Д. Каци (Луганськ)
С.А.Кащенко (Луганськ)
О.М.Клімочкіна (Луганськ)
В.І.Коломієць (Луганськ)
В.М.Комаревцев (Луганськ)
Р.Крегг (Лондон, Велика Британія)
І.М.Кузнецова (Санкт-Петербург, Росія)
В.Д.Лук'янчук (Луганськ)
О.М.Магомедов (Київ)
О.А.Максимкіна (Москва, Росія)
Л.О.Мальцева (Дніпропетровськ)
В.Й.Мамчур (Дніпропетровськ)
М.Мейз (Сан-Франциско, США)
О.Д.Немятих (Луганськ)
О.А.Орлова (Луганськ)
М.С.Пономаренко (Київ)
Ю.Г.Пустовий (Луганськ)
О.С.Решетнікова (Луганськ)
Б.П.Романюк (Луганськ)
Л.В.Савченкова (Луганськ)
С.М.Смірнов (Луганськ)
І.І.Тернинко (Луганськ)
В.М.Толочко (Київ)
Ю.А.Хунов (Луганськ)
В.А.Шаповалова (Харків)
В.В.Шаповалов (Харків)
І.П.Шлапак (Київ)

ЛІТЕРАТУРНІ РЕДАКТОРИ
В.С.Косенко (Луганськ)
К.К.Налапко (Луганськ)

РЕДАКЦІЙНА РАДА:
М.А.Волошин (Запоріжжя)
В.Г.Ковешніков (Луганськ)
Л.В.Новицька-Усенко (Дніпропетровськ)
В.І.Черній (Донецьк)

Журнал заснований ДЗ «Луганський державний медичний університет» в жовтні 2006 р.

Журнал зареєстрований Державним комітетом телебачення та радіомовлення України 24.01.2006, свідоцтво КВ № 10905.

Журнал зареєстрований Вищою атестаційною комісією України як фаховий, в якому можуть публікуватися результати дисертаційних досліджень, за напрямами: **Медичні науки, біологічні науки, фармацевтичні науки** (Постанова Президії ВАК України 1-05/8 від 11.10.2007 р. та №1-05/3 від 08.07.2009 р.).

Журнал включено до бази даних реферованих журналів Всеросійського інституту наукової і технічної інформації Російської академії наук. Статті проходять процедуру внутрішнього та зовнішнього рецензування.

Адреса редакції: «Український журнал клінічної та лабораторної медицини», ДЗ «Луганський державний медичний університет», кв. 50-річчя Оборони Луганська, 1. Луганськ, 91045, Україна. Телефон / факс: 0642-532036. E-mail: nalapko@ukr.net

Рекомендовано до друку Вченою Радою ДЗ «Луганський державний медичний університет» (протокол №4 від 04.04.2013). Підписано до друку 11.04.2013. Рік випуску восьмий. Формат 60х84,8. Папір офсетний. Замовлення №20. Тираж 500 прим.

Видавник та виготовлювач: ДЗ «Луганський державний медичний університет», кв. 50-річчя Оборони Луганська, 1. Луганськ, 91045, Україна. Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до Державного реєстру України видавців, виготівників та розповсюджувачів видавничої продукції ДК №609 від 21.09.2001 р., видане Державним комітетом інформаційної політики, телебачення та радіомовлення України.

ЗМІСТ

ЛЕКЦІЇ

М.М.Аскеров. Артериальная гипертензия при сахарном диабете	4
А.Б.Рустамова. Геморрой — современный взгляд на проблему	9

ОГЛЯДИ ЛІТЕРАТУРИ

С.В.Витрищак, В.В.Бондаренко, И.И.Изоркина, С.Ю.Гаврик, М.В.Бондаренко, Е.В.Санина. Воздействие толуола на организм человека и меры профилактики12	12
І.К.Нурметова, І.Д.Кухар, Л.А.Ковальчук, О.В.Кривов'язю Роль тиреоїдних гормонів у підтримці гомеостазу	17
Ю.С.Прокопенко. Перспективи застосування деяких представників родин Айстрові та Макові для лікування псоріазу	22

ОРИГІНАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ

В.В.Шаповалов. Організаційно-правові заходи з підвищення рівня доступності наркопацієнтів до медико-фармацевтичної допомоги	28
К.О.Дегтярьова, Л.І.Вишневська, Т.Г.Ярних, О.Ю.Ткачук. Перспективи використання рослинної сировини гарбуза для створення лікарського препарату на його основі	31
Ф.С.Кулиева. Допплерометрическая и морфогистохимическая характеристика фетоплацентарной системы у беременных с анемией	36
Н.В.Хохленкова, Т.Г.Ярних, М.В.Буряк. Дослідження стабільності мазі з густим екстрактом кори дуба	41
О.А.Євтіфєєва, К.І.Проскуріна, А.Ю.Мордінсон, М.О.Хмельова, Л.П.Савченко. Валідація методик кількісного визначення компонентів саліцилово-резорцинового спиртового розчину	44
С.А.Куценко, О.А.Рубан. Дослідження показників якості лікарської рослинної сировини настойки «Венотон»	49
О.В.Кривов'яз, Ю.О.Томашевська. Екстемпоральні стоматологічні лікарські форми та допоміжні речовини в їх технології	52
Я.О.Бутко. Дослідження впливу крему «Мометазон з керамідами» на перебіг алергічного контактного дерматиту	55
С.М.Коваленко. Термогравіметричне дослідження нового лікарського засобу для лікування діабетичних виразок	59
В.В.Руденко. Розробка технології виготовлення мазі для лікування ран у фазі ранового процесу	63
Л.М.Іванова, К.К.Налапко. Стан клітинної ланки імунітету у пацієнтів з неалкогольним стеатогепатитом, сполученим з хронічним бронхітом та ожирінням	66
В.Г.Климовицкий, В.Ю.Черныш, Лафи Хатем. Дифференцированный подход к выбору способа остеосинтеза внесуставных переломов костей голени	70
А.И.Ниженковский, В.Д.Лукьянчук, Д.С.Кравец, В.С.Федорова, И.И.Сейфуллина, Е.Е.Марцинко, О.Г Песарогло. Сравнительная токсикометрия потенциального церебропротектора ВИТАГЕРМ-2 в норме и на модели закрытой черепно-мозговой травмы	74
Е.Е.Алыпова, К.В.Величко, В.В.Тимофейчук. Использование мази «Хондроксид» в сочетании с физиотерапевтическими методами лечения больных с остеоартрозом коленных суставов	78
А.Ш.Рзаева. Сравнительная оценка распространения полиморфизма интерлейкина-8-251-Т\А среди женщин Азербайджана, страдающих внутренним эндометриозом	81
Г.З.Алиева. Особенности клинического течения острого гепатита В на фоне хронических персистирующих инфекций различной этиологии	84
С.Д.Ахмедова. Клинико-эпидемиологическая оценка заболеваемости поверхностными микозами кожи в городе Баку за период 2000-2012 гг.	88
Х.Д.Рустамова. Состояние плода и новорожденного у беременных с гельминтно-протозойными инвазиями	91
Г.І.Мельник. Дослідження оптимальних умов екстракції алкалоїдів чемериці	94
Г.И.Бабаева. Возможные причины и прогностические критерии развития плацентарной недостаточности	97
А.В.Гарницька. Взаємовідносини між даними нейрометрії та клінічною характеристикою діабетичної полінейропатії	101
О.М.Біловол, П.Г.Кравчун, Н.С.Трифонова. Характер змін прозапальних цитокінів (інтерлейкіну-6 та фактора некрозу пухлин-α) у хворих на нестабільну стенокардію із супутнім цукровим діабетом 2 типу	105
В.А.Азизов, М.Дж.Султанова, Дж.З.Гамишаев. Особенности поражения коронарных сосудову больных с ишемической болезнью сердца на фоне сахарного диабета	109
С.Д.Кузовкова, И.В.Лискина. Гистохимическое изучение кислой и щелочной фосфатаз в тканях легких при мультирезистентном фиброзно-кавернозном туберкулезе	113
Н.Б.Пилькевич. Физическое развитие детей школьного возраста с дефектами зрения	119
О.І.Захарчук. Клініко-лабораторні прояви токсокарозу у дітей	123
С.Б.Имамвердиев, Р.Т.Гусейн-заде. Связь индекса массы тела с минерально-солевым составом мочевого камня у больных с мочекаменной болезнью среди населения Гахского района Азербайджанской Республики	129

Ш.Б.Вагабова, Э.М.Алиева, Н.Н.Ахундова, Ш.Ш.Асадова. Особенности эхографических показателей при истмико-цервикальной недостаточности	**132**
Т.І.Єрмоленко, Т.В.Деєва, І.А.Отрішко. Дослідження впливу препарату «Фларосукцин» на морфологічну структуру нирок за умов розвитку експериментальної ниркової недостатності	**136**
О.П.Бабкіна. Зміни ультразвукових показників селезінки при сполученій травмі в залежності від давності її заподіяння	**140**
И.В.Иоффе, Е.П.Храброва, Е.А.Ляшенко. Исследование концентрации иммунорегуляторных цитокинов сыворотки при аутоиммунных тиреопатиях	**143**
Д.А.Алиев, Л.А.Меджидова, Р.С.Зейналов, Ш.Ш.Османов, Б.Э.Аббасов. Сравнительное изучение результатов иммуногистохимического исследования первичной опухоли и метастатически пораженных лимфоузлов у больных раком молочной железы	**147**
О.В.Покас, М.М.Лоскутова, О.І.Поліщук, В.В.Яновська. Поширення штамів продуцентів метало-бета-лактамаз серед множиннорезистентних до антибіотиків грамнегативних неферментуючих бактерій	**150**
Ж.В.Собкова, Е.И.Полищук. Динамика выделения и видовой состав дрожжеподобных грибов рода Candida, изолированных от больных многопрофильного стационара	**155**
С.В.Колісник, О.М.Свєчнікова, О.Ф.Винник, І.Ю.Петухова, О.В.Колісник. Реакційна здатність метилових естерів N-[(2-оксоіндолін-3-іліден)-2-оксіацетил]амінокислот	**159**
I.M.Borovs'ka, M.Ye.Blazheyevskiy, V.O.Yevtukhov. Catalimetric determination of nanogram amounts of copper (II) using the chemiluminescence method	**162**
А.С.Гасанова, Э.М.Алиева. Состояние гипоталамо-гипофизарно-надпочечниково-яичниковой системы и функциональной активности щитовидной железы при синдроме поликистозных яичников и инсулинорезистентности	**166**
О.С.Крыськив. Количественные отношения структура — биологическая активность в ряду 2-R-3-гидрокси-4-оксо(3,4-дигидро)хиназолин-4-онов	**169**
И.А.Вишницкая, Д.И.Маракушин, О.А.Наконечная. Влияние оксиэтилированных алкилфенолов на состояние белкового обмена в подостром токсикологическом опыте	**173**

© Український журнал клінічної та лабораторної медицини, 2013. Усі права захищені. Передрукування тільки з письмового дозволу редакції. Відповідальність за вірність даних, цитат, формул, доз препаратів тощо несуть автори статей та рекламодавці. Публікація матеріалів в «Українському журналі клінічної та лабораторної медицини» не означає безумовного розділення редакцією видання поглядів авторів статей та рекламодавців.

© Український журнал клінічної та лабораторної медицини, 2013
УДК 615.276: 615.254.1: 519.233.5: 547.856.1

Количественные отношения структура — биологическая активность в ряду 2-R-3-гидрокси-4-оксо(3,4-дигидро)хиназолин-4-онов

О.С.Крыськив

Национальный фармацевтический университет, кафедра неорганической химии
Харьков, Украина

Рассчитаны значения logP для некоторых производных 2-R-3-гидрокси-4-оксо(3,4-дигидро)хиназолин-4-она и для установления количественных зависимостей проведен их регрессионно-корреляционный анализ с данными биологической активности. Установлены некоторые количественные закономерности структура/действие в ряду указанных соединений на основе проведения корреляции теоретически рассчитанных значений logP с результатами биологических исследований. Показано, что logP хорошо коррелирует со значениями диуретической и противовоспалительной активности.

Ключевые слова: липофильность, корреляция, биологическая активность, хиназолин-4-оны.

ВВЕДЕНИЕ

В решении проблемы поиска новых лекарственных препаратов важным этапом является поиск количественной связи между структурой веществ и их активностью (QSAR-анализ) [3]. Изначально методы QSAR были разработаны и развиты для повышения эффективности синтеза и поиска новых лекарственных препаратов и пестицидов [16, 17]. В этих условиях QSAR-анализ проводится на выборке близкородственных соединений, имеющих сходную химическую структуру.

При наличии экспериментальных данных для ряда соединений, с помощью количественных соотношений структура/действие можно рассчитать активность неисследованных соединений, учитывая то, что вещества похожего молекулярного строения ведут себя одинаково в одинаковых условиях [4]. Установление количественных связей дает возможность конструирования более эффективных препаратов на основе выявленных закономерностей.

В корреляционных подходах для обнаружения степени сходства молекулярных структур использую количественные характеристики — молекулярные дескрипторы. Такими дескрипторами могут быть разнообразные физико-химические величины, значения которых можно получить экспериментально или рассчитать, а также математические конструкции — топологические индексы и др. [4, 5, 15, 18].

Одним из физико-химических параметров, влияющих на биологическую активность вещества, является коэффициент распределения вещества в среде — октанол-вода (logP) [14]. Растворимость в липидах (липофильность) имеет основное значение для процессов проникновения и распределения больших молекул в организме. Высока роль липофильности в накоплении (депонировании) этих веществ в живых организмах. Нерастворимые в жирах молекулы могут попасть в организм из окружающей среды лишь в том случае, если они проходят через поры биологических мембран либо переносятся через барьеры с помощью специальных механизмов, например пиноцитоза и т.д.

Жирорастворимость и водорастворимость — связанные между собой свойства. Чем полярнее молекула вещества, тем лучше она растворяется в воде и хуже — в липидах. Наибольшей биологической активностью, как правило, обладают вещества с промежуточной растворимостью [7].

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

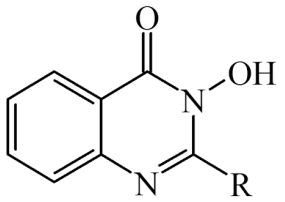
Ранее [12, 13] нами синтезирован ряд 2-R-3-гидрокси-4-оксо(3,4-дигидро)хиназолин-4-онов общей формулы:

ТАБЛИЦА 1

Обобщенные результаты исследования некоторых видов биологического действия* и расчетные значения logP соединений 1-18

Соединение	logP	Диуретическая активность	Противовоспалительная активность
1	-0,455	106,5	46,5
2	0,044	55,4	21,4
3	0,573	98,7	14,6
4	0,107	65,6	21,2
5	1,643	66,1	2,8
6	-0,204	74,6	28,7
7	-0,318	68,8	48,7
8	-0,694	108,6	48,9
9	0,668	76,6	14,6
10	-0,358	161,4	47,6
11	-0,956	170,2	45,8
12	-0,642	126,5	48,2
13	0,196	76,2	16,8
14	0,132	82,6	19,7
15	1,147	67,6	10,6
16	-1,203	112,4	45,5
17	-1,418	89,9	52,6
18	-1,248	102,6	50

Примечание: ** — значения приведены в % к контролю.*



R = H (1), Me (2), Et (3), CH_2Cl (4), Ph (5), CO_2Et (6), $CH_2CH_2CO_2Me$ (7), $CH_2CH_2CO_2H$ (8), o-$C_6H_4CO_2H$ (9), $CH{=}CHCO_2H$ (10), $CONH_2$ (11), CONHMe (12), CONH-н-Pr (13), $CONHCH_2CH{=}CH_2$ (14), CONHBz (15), $CONHCH_2CH_2OH$ (16), $CONHNH_2$ (17), CONHOH (18)

Изучено их диуретическое и противовоспалительное действие [9, 10] (табл. 1).

Следующим этапом работы стало установление возможных корреляций и количественных зависимостей между рассчитанными значениями logP и экспериментально установленными данными биологической активности соединений 1-18 (табл. 1).

Значения logP рассчитывали с использованием программы ChemBio3DUltra 12.0 программного пакета ChemBioOffice2012 [6].

Количественные зависимости видов биологической активности от logP (корреляционно-регрессионный анализ) установлены с помощью программы STATISTICA 8 [1, 2, 8]. Чем ближе коэффициент корреляции находился к ±1, тем больше связь между признаками. Согласно принятым в математической статистке требованиям, такую связь оценивали как: <0,3 — связь отсутствует, 0,4-0,7 — связь средняя, >0,7 — связь тесная [16, 20, 21].

Всего в статистическую выборку было включено 18 соединений. Во время статистической обработки результатов фармакологических исследований при анализе выборки длиной в 18 случаев статистически достоверными считают значения коэффициента корреляции Пирсона больше 0,40 ($p \leq 0,05$).

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Анализ данных статистической обработки результатов свидетельствует о том, что показатель logP коррелирует со значениями противовоспалительной (%) (r=-0,9128) и диуретической (%) (r=-0,5287) активности. Отметим, что в обоих случаях наблюдалось отрицательное значение корреляции (рис. 1, 2).

Такие сочетания коэффициентов корреляции Пирсона и показателей значимости свидетельствуют о достоверности графиков и уравнений, приведенных на рис. 1 и 2.

Известно, что диуретическое действие зависит от кислотности исследуемых соединений, которая

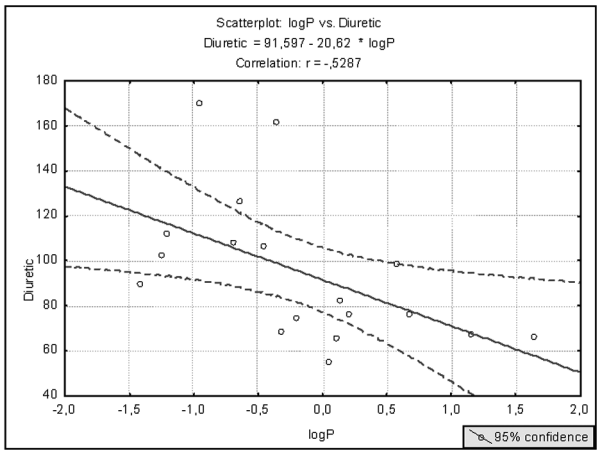


Рис. 1. Корреляция диуретической активности и logP.

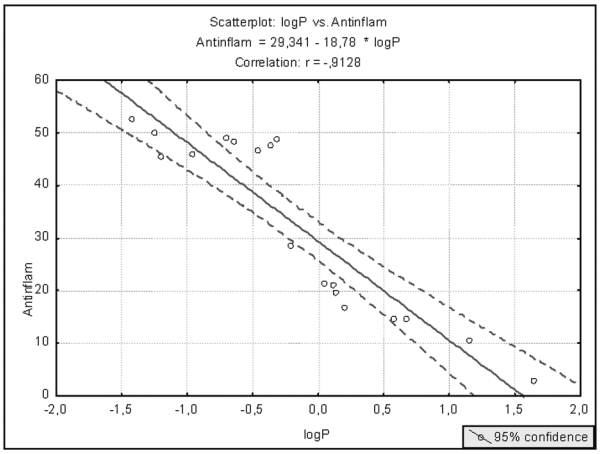


Рис. 2. Корреляция противовоспалительной активности и logP.

определяется наличием в их структуре определенных функциональных групп; влияние кислотных свойств на диурез объясняют их влиянием на транспорт электролитов в организме [11].

Значительное количество производных карбоновых кислот, проявляющих выраженные фармакологические свойства, проявляли и противовоспалительное действие [11]. Видимо, это связано с тем, что моно- и дикарбоновые кислоты являются природными метаболитами организма, они входят в цикл Кребса и активируют метаболические процессы, что способствует уменьшению воспаления.

Сказанное, возможно, и объясняет как высокую диуретическую и противовоспалительную активность, так и наличие количественной зависимости структура/свойства»/ в случае 2-R-3-гидрокси-4-оксо(3,4-дигидро)хиназолин-4-онов 1-18, содержащих в своей структуре фрагменты моно- (соед. 1-6, 11-18) и дикарбоновых (соед. 7-10) кислот.

Установление количественных зависимостей выраженности биологического действия от расчетных значений logP в перспективе даст возможность прогнозировать наличие и степень проявления тех или иных фармакологических свойств в ряду 2-R-3-гидрокси-4-оксо(3,4-дигидро)хиназолин-4-онов и будет способствовать оптимизации целенаправленного поиска БАВ в данном ряду веществ.

ВЫВОДЫ

1. Рассчитаны значения logP для некоторых 2-R-3-гидрокси-4-оксо(3,4-дигидро)хиназолин-4-онов.

2. С целью установления количественных зависимостей структура/свойства проведен их регрессионно-корреляционный анализ.

3. Установлено, что показатель logP хорошо коррелирует с уровнями диуретической и противовоспалительной активности (отрицательные значения корреляции).

ЛИТЕРАТУРА

1. Боровиков В.П. STATISTICA: искусство анализа данных на компьютере. Для профессионалов. 2-е изд. / В.П.Боровиков. — С.-Пб.: Питер, 2003. — 688 с.
2. Вуколов Э.А. Основы статистического анализа / Э.А.Вуколов. — М.: Форум, 2008. — 464 с.
3. Орлов В.Д. Медицинская химия / В.Д.Орлов, В.В.Липсон, В.В.Иванов. — Х.: Фолио, 2005. — 464 с.
4. Перехода Л.О. QSAR-аналіз похідних 1,2,3-триазолу(1Н), що проявляють протисудомну активність / Л.О.Перехода // Вісник фармації. — 2012. — Вип. 1 (69). — С. 54-56.
5. Поройков В.В. Компьютерный прогноз биологической активности химических соединений как основа для поиска и оптимизации базовых структур новых лекарств / В.В.Поройков, Д.А.Филимонов // В сб.: Азотистые гетероциклы и алкалоиды. Т. 1.. — М.: Иридиум-пресс, 2001. — С. 123-129.
6. Соловьев М.Е. Компьютерная химия / М.Е.Соловьев, М.М.Соловьев. — М.: Солон-пресс, 2005. — 536 с.
7. Тиньков О.В. Исследование острой токсичности и физико-химических свойств органических соединений / О.В.Тиньков, П.Г.Полищук, А.Г.Артеменко [и др.] // J. of Siberian Federal University. Chemistry 1. — 2012. — №5. — P. 95-104.
8. Халафян А.А. STATISTICA 6. Статистический анализ данных / А.А.Халафян. 3-е изд. Учебник. — М.: Бином-пресс, 2007. — 512 с.
9. Черних В.П. Синтез та вивчення антиексудативної дії похідних хіназолін-4-ону, що містять гідроксамовий фрагмент / В.П.Черних, Л.А.Шемчук, Г.П.Жегунова [та ін.] // В. кн.: Клінічна фармація в Україні. Матеріали VI Всеукр. наук.-практ. конф. — Х.: НФаУ, 2007. — С. 150.

10. Черних В.П. Пошук сполук з діуретичною дією серед N-гідроксипохідних 4-оксо-3,4-дигідрохіназоліну / В.П.Черних, Л.А.Шемчук, О.С.Криськів [та ін.] // В кн.: Створення, виробництво, стандартизація, фармакоекономічні дослідження лікарських засобів та біологічно активних добавок. Матеріали наук.-практ. конф. — Х.: НФаУ, 2006. — С. 36-37.
11. Черных В.П. Синтез, реакционная способность и изучение связи «структура-биологическая активность» производных дикарбоновых кислот: автореф. дисс. ... д.хим.н. / В.П.Черных. — Х., 1990. — 40 с.
12. Шемчук Л.А. Синтез 2-R-3-гідроксихіназолін-4-онів та їх хімічні перетворення / Л.А.Шемчук, В.П.Черних, О.С.Криськів // Журнал органічної та фармацевтичної хімії. — 2005. — Т. 3, вип. 3 (11). — С. 9-12.
13. Шемчук Л.А. Реакция амидов антраниловой кислоты с циклическими ангидридами / Л.А.Шемчук, В.П.Черных, О.С.Крыськив // ЖОрХ. — 2006. — Т. 42, вып. 3. — С. 395-399.
14. Agmon N. Structure-reactivity correlations in state-tostate chemistry / N.Agmon // J. Chem. Phys. — 1982. — Vol. 76, №4. — P. 1759-1769.
15. Eros D. Reliability of logP Predictions Based on Calculated Molecular Descriptors: A Critical Review / D.Eros, I.Kelvesdi, L.Orfi [et al.] // Curr. Med. Chem. — 2002. — Vol. 9, №20. — P. 1819-1829.
16. Fujita T. Recent success stories leading to commercializable bioactive compounds with the aid of traditional QSAR procedures / T.Fujita // QSAR. — 1997. — Vol. 16. — P. 107-112.
17. Grangust L. Editing in survey data: how much it enough? / L.Grangust, J.G.Kovar / The Survey Management and Process Quality. — New York: Wiley, 1997. — P. 415-435.
18. Guidance document on the validation of (guantitative) structure — activity relationships[(Q)SAR] models / OECD Environment health and safety publications, series on testing and assessment. — 2007. — №69. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: http//www. oecd. org /document/ 4/03343. en_2649_34379_42926724_1_1_1_1.00 html
19. Hansch C. QSAR. Part I. Fundamentals and applications in chemistry and biology / C.Hansch, A.Leo // American. Chem. Soc. — Washington, D, 1995. — 580 p.
20. Rivere P. Quality et Statistique / P.Rivere // Courrier des statistique. — Paris: INSEE. — 1999. — №90. — P. 47-58.
21. Statistics Canada 2003. Survey methods and practices. Statistic Canada Catalogue no. 12-587-XPE, Ottawa, Ontario, 396 p.

О.С.Криськів. Кількісні співвідношення структура — біологічна активність у ряду 2-R-3-гідрокси-4-оксо (3,4-дигідро)хіназолін-4-онів. Харків, Україна.

Ключові слова: *ліпофільність, кореляція, біологічна активність, хіназолін-4-они.*

Розраховані значення logP для деяких похідних 2-R-3-гідрокси-4-оксо (3,4-дигідро)хіназолін-4-ону і, для встановлення кількісних залежностей проведений їх регресійно-кореляційний аналіз з даними біологічної активності. Встановлено деякі кількісні закономірності структура/дія у ряду зазначених сполук на основі проведення кореляції теоретично розрахованих значень logP з результатами біологічних досліджень. Показано, що logP добре корелює зі значеннями діуретичної і протизапальної активності.

O.S.Kryskiw. Quantitative relations structure — biological activity of some derivatives 2-R-3-hydroxy-4-oxo(3,4-dihydro)quinazoline-4-one. Kharkiv, Ukraine.

Key words*: lipophilicity, correlation, biological activity, quinazolin-4-ones.*

The values of logP for some derivatives of 2-R-3-hydroxy-4-oxo(3,4-dihydro)quinazoline-4-one were calculated with the purpose to establish their quantitative correlation with information about their biological action. Some "structure-activity" correlations between calculated logP values of tested and the results of biological activity study have been made. It is shown, that logP value well correlates with the values of diuretic and anti-inflammatory activity.

Надійшла до редакції 06.03.2013 р.