



XXII МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД
ПО ОБЩЕЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

В 7 ТОМАХ

ТОМ 5

7 — 12.10.2024

Федеральная территория «Сириус»



XXII МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД ПО ОБЩЕЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ

*Посвящённый 190-летию Д.И. Менделеева
и 300-летию основания Российской академии наук*

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Том 5

Сборник тезисов в 7 томах

7 –12 октября, 2024
Федеральная территория «Сириус», Россия

УДК 54+66
ББК 24+35
М501

М501 XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, 7-12 октября, 2024, Федеральная территория «Сириус», Россия. Сборник тезисов докладов в 7 томах. Том 5. — М.: ООО «Буки Веди», 2024. — 372 с. — ISBN 978-5-00202-669-2 (т. 5)

ISBN 978-5-00202-664-7

В сборнике представлены материалы XXII Менделеевского съезда по общей и прикладной химии, которая проходит с привлечением ведущих экспертов на должном международном уровне.

Тезисы докладов представлены в авторской редакции.

Для широкого круга электрохимиков, химиков, физиков, экологов, инженеров, специалистов научно-исследовательских групп, организаций, аспирантов и студентов.

ISBN 978-5-00202-669-2 (т. 5)
ISBN 978-5-00202-664-7

© Авторы научных статей, 2024
© ООО «Буки Веди», 2024

ДИЗАЙН НЕЙРОПРОТЕКТОРНЫХ ВЕЩЕСТВ – МОДУЛЯТОРОВ АМРА-РЕЦЕПТОРОВ

**Палюлин В.А.^а, Лавров М.И.^а, Радченко Е.В.^а, Веремеева П.Н.^а,
Голубева Е.А.^а, Мэттьюс Д.^а, Аверина Е.Б.^а, Седенкова К.Н.^а,
Василенко Д.А.^а, Замойский В.Л.^б, Григорьев В.В.^{а,б}**

^аХимический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 3,
e-mail: vap@qsar.chem.msu.ru

^бИнститут физиологически активных веществ ФИЦ ПХФ и МХ РАН,
142432, Московская область, г. Черноголовка, Северный проезд 1

В качестве перспективных нейропротекторных веществ рассматриваются положительные аллостерические модуляторы (ПАМ) ионотропных глутаматных рецепторов АМРА-типа. Интенсивный ионный ток, вызванный действием таких модуляторов на АМРА-рецепторы, с последующей деполяризацией постсинаптической мембраны, запускает механизм экспрессии генов, отвечающих за синтез факторов роста нервной ткани NGF (nerve growth factor) и BDNF (brain-derived neurotrophic factor). Кроме того, ПАМ АМРА-рецепторов оказывают существенное влияние на процессы обучения и формирования памяти. Поэтому лекарственные вещества, действующие таким образом на АМРА-рецепторы, могут быть эффективны при лечении нейродегенеративных заболеваний¹.

В докладе обсуждаются подходы к компьютерному молекулярному дизайну модуляторов АМРА-рецепторов на основе исследований молекулярной динамики комплексов агонист-рецептор-модулятор для различных сайтов связывания модуляторов в рецепторе. Рассматриваются механизмы действия лигандов АМРА-рецептора, ответственные за проявление различных терапевтических эффектов. Наиболее перспективные соединения синтезированы и исследованы *in vitro* и *in vivo*. Результаты моделирования подтверждены экспериментальными данными. Найден ряд новых перспективных соединений с пиколярной активностью, уникальным сочетанием свойств и низкой токсичностью.

Литература

1. Golubeva E.A., Lavrov M.I., Radchenko E.V., Palyulin V.A. *Biomolecules*, 2023, **13**, 56.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-15-00041.