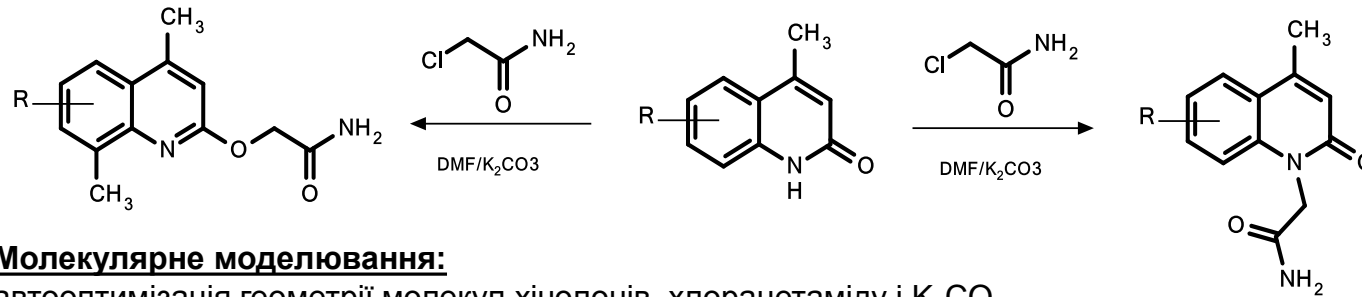


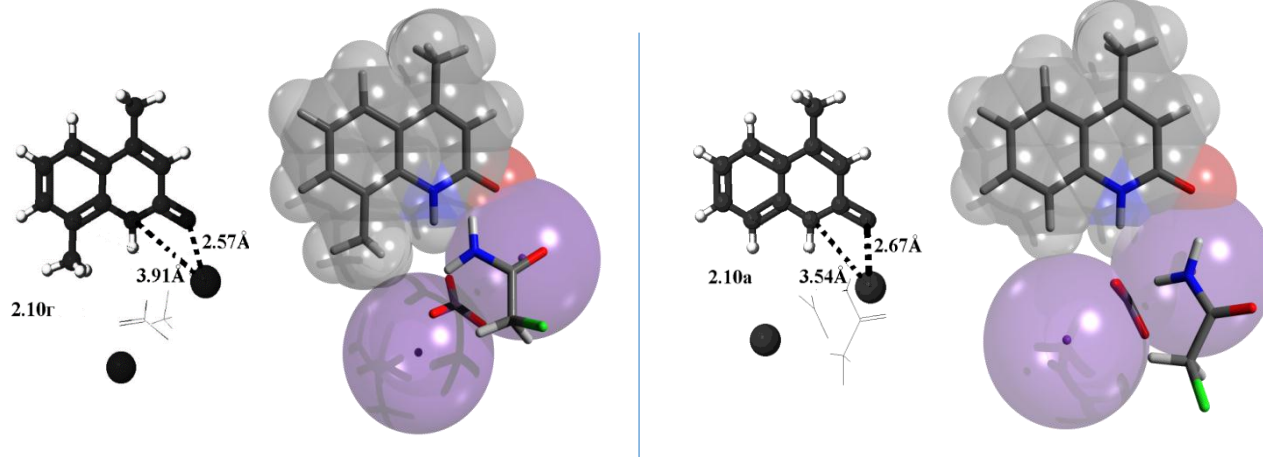
Синтез нових БАР гетероциклічної природи на основі метиленактивних вихідних реагентів. Раціональний дизайн структур БАР на основі даних віртуального скринінгу та комп'ютерних розрахунків прогнозу біологічної активності серед похідних хінолін-2-онів, хінолін-4-онів та 2,4-піролідиндіонів

Теоретична модель, що пояснює региоселективність алкілювання 4 метил-2(1H)-хінолонів амідами хлороцтової кислоти



Молекулярне моделювання:

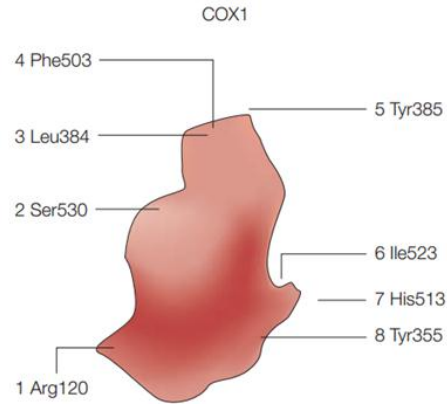
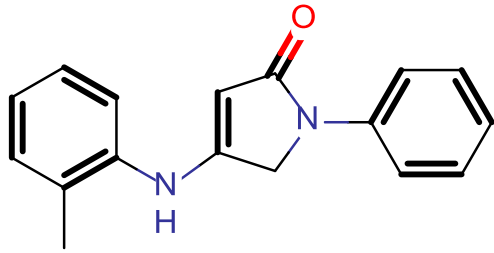
автооптимізація геометрії молекул хінолонів, хлорацетаміду і K₂CO₃ за алгоритмом градієнтного спуску в силовому полі MMFF94s.



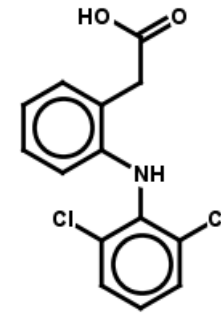
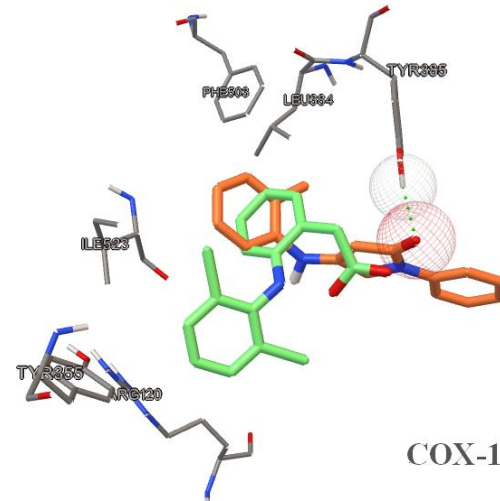
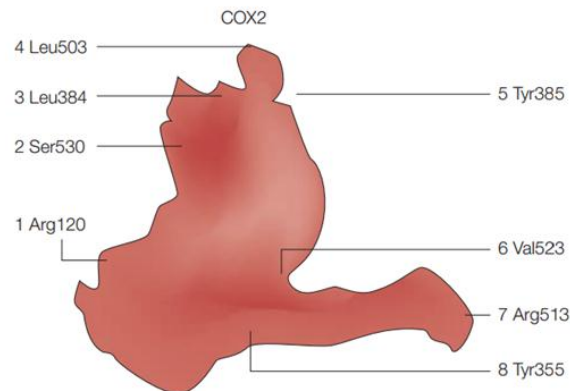
Зубков Вадим Олексійович – доктор фармацевтичних наук, доцент [кафедри медичної хімії](#).

Ортолон

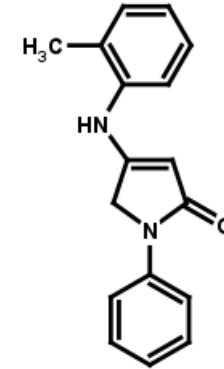
Фармакологічна група – нестероїдний протизапальний препарат комплексної дії



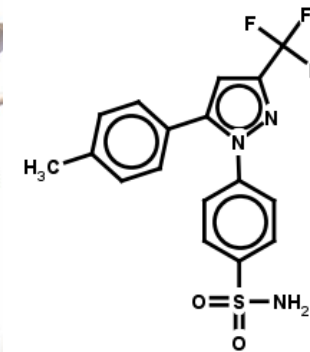
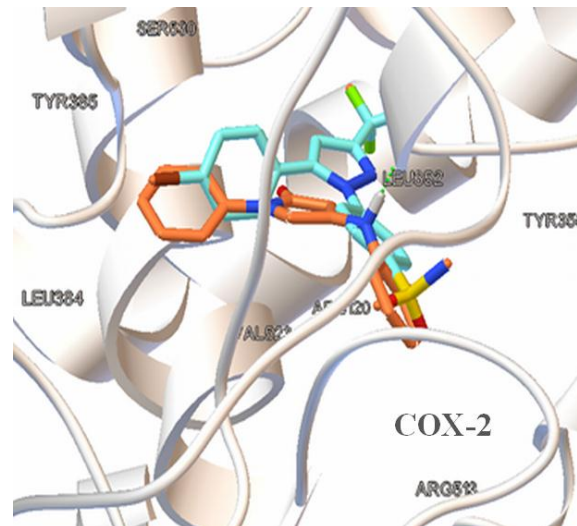
Flower R.J. The development of COX2 inhibitors // Nature Reviews Drug Discovery. – vol. 2. – мар. 2003. – с. 179–191.



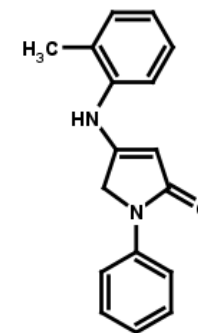
Диклофенак



Ортолон



Целекоксиб



Ортолон