**Примена технике претраге R-група за молекулски дизајн дипептидилборне киселине инхибитора протеазома**

ЏИАН-БО ТАНГ\*, ЈУАН-ЈУАН ЛАЈ, ГВО-ЈЕН ЏИАНГ И КЕНГ-НЕН ЛАЈ

*Факултет за хемију и хемијско инжењерство, Шанши Универзитет за науку и технологију, Ши’ен 710021, НР Кина*

*ИЗВОД*

У овом раду је, направљен 3D-QSAR модел који укључује 40 дипептидилборних киселина инхибитора протеазома на основу Topomer CoMFA, коефицијенти вишеструке корелације, унакрсне валидације и екстерне валидације су 0,908, 0,647 односно 0,703. Резултати указују да добијени Topomer CoMFA модел не само да има повољну стабилност процењивања већ и добрру способност предвиђања. Topomer Search је примењен као алат за виртуелну претрагу ZINC базе података на ''лид''-слична (lead-like) једињења. На крају су, 1 R1 група, 7 R2 група и 6 R3 група са вишим доприносима, употребљене за наизменичну супституцију R1, R2 и R3 шаблонског једињења 23 са највишом биоактивношћу. Као последица су успешно синтетизована 33 нова молекула са вишом активношћу од шаблонског молекула. Резултати су показали да Topomer Search технологија може да се ефикасно примени за претрагу и дизајн нових дипептидилборних киселина инхибитора протеазома и да има способност предвиђања за усмеравање при дизајнy нових дипептидилборних киселина инхибитора протеазома.

*Кључне речи*: квантитативан однос структуре и активности (QSAR); инхибитори протеазома; Topomer CoMFA; Topomer search; дизајн нових инхибитора.