

Электронный дополнительный материал

УДК 577(11+151+181)

РАЗРАБОТКА ПОДХОДОВ К МОЛЕКУЛЯРНОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ КОМПОНЕНТОВ ГУМИНОВЫХ ВЕЩЕСТВ С БЕТА-ЛАКТАМАЗАМИ НА ПРИМЕРЕ ГУМИНОПОДОБНЫХ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ АНАЛОГОВ*

© С.А. Владимиров**, Г.Д. Рухович, Е.В. Радченко, И.В. Перминова

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический
факультет, 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 3,
vladimirof.work@gmail.com

* Полный текст статьи опубликован: Владимиров С.А., Рухович Г.Д., Радченко Е.В., Перминова И.В. Разработка подходов к молекулярному моделированию взаимодействия биологически активных компонентов гуминовых веществ с бета-лактамазами на примере гуминоподобных низкомолекулярных аналогов // Химия растительного сырья. 2024. №2. С. 329–339. DOI: 10.14258/jcprtm.20240213955.

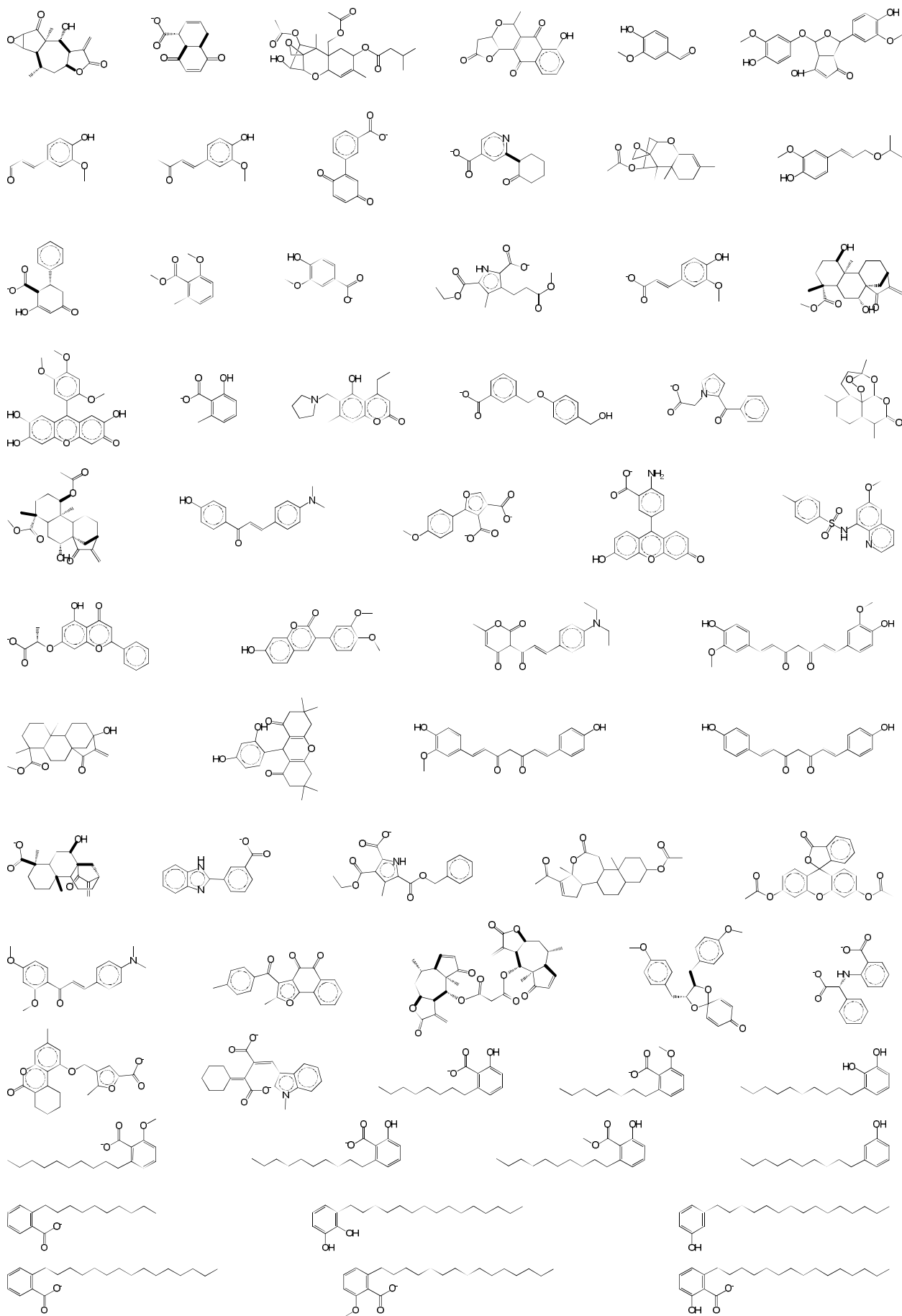
** Автор, с которым следует вести переписку.

Массы и брутто-формулы ингибирующей фракции гуминовых кислот угля

Масса, г/моль	Брутто- формула	Масса, г/моль	Брутто- формула	Масса, г/моль	Брутто- формула	Масса, г/моль	Брутто- формула
1	2	3	4	5	6	7	8
208	C ₆ H ₈ O ₆ S	240	C ₁₀ H ₈ O ₇	252	C ₁₀ H ₄ O ₈	260	C ₁₃ H ₂₈ N ₂ O ₃
211	C ₁₀ H ₁₃ NO ₄	240	C ₁₄ H ₈ O ₄	252	C ₁₁ H ₈ O ₇	261	C ₁₃ H ₁₁ NO ₅
211	C ₁₂ H ₂₁ NO ₂	240	C ₁₅ H ₁₂ O ₃	252	C ₁₂ H ₁₂ O ₆	261	C ₁₄ H ₁₅ NO ₄
212	C ₁₃ H ₂₄ S	240	C ₁₂ H ₁₆ O ₃ S	252	C ₁₃ H ₁₆ O ₅	261	C ₁₂ H ₂₃ NO ₃ S
214	C ₁₃ H ₁₄ N ₂ O	240	C ₁₃ H ₂₀ O ₄	252	C ₁₅ H ₂₄ O ₃	262	C ₉ H ₁₀ O ₇ S
215	C ₁₂ H ₉ NO ₃	242	C ₁₀ H ₁₀ O ₇	254	C ₁₀ H ₆ O ₈	262	C ₁₃ H ₁₀ O ₆
217	C ₈ H ₁₁ NO ₆	242	C ₁₄ H ₁₀ O ₄	254	C ₁₁ H ₁₀ O ₇	262	C ₁₅ H ₁₈ O ₄
219	C ₁₂ H ₁₃ NOS	242	C ₁₄ H ₃₀ N ₂ O	254	C ₁₅ H ₁₀ O ₄	262	C ₁₆ H ₂₂ O ₃
219	C ₁₀ H ₂₁ NO ₂ S	243	C ₉ H ₉ NO ₇	254	C ₉ H ₁₈ O ₆ S	263	C ₁₂ H ₉ NO ₆
220	C ₁₁ H ₈ O ₅	243	C ₁₃ H ₂₅ NO ₃	254	C ₁₆ H ₁₄ O ₃	263	C ₁₆ H ₉ NO ₃
220	C ₈ H ₁₆ N ₂ O ₅	244	C ₁₁ H ₄ N ₂ O ₃ S	254	C ₁₃ H ₁₈ O ₃ S	263	C ₁₀ H ₁₇ NO ₅ S
223	C ₁₁ H ₁₃ NO ₂ S	244	C ₁₃ H ₈ O ₅	254	C ₁₃ H ₁₈ O ₅	264	C ₈ H ₈ O ₈ S
224	C ₁₀ H ₈ O ₆	244	C ₁₄ H ₁₂ O ₄	254	C ₁₄ H ₂₂ O ₂ S	264	C ₁₂ H ₈ O ₅ S
224	C ₁₄ H ₈ O ₃	244	C ₁₅ H ₁₆ O ₃	254	C ₁₄ H ₂₂ O ₄	264	C ₁₂ H ₈ O ₇
224	C ₁₄ H ₁₂ N ₂ O	244	C ₁₆ H ₂₀ S	254	C ₁₅ H ₂₆ O ₃	264	C ₁₃ H ₁₂ O ₆
224	C ₁₁ H ₁₆ N ₂ O ₃	244	C ₁₆ H ₂₀ O ₂	255	C ₁₄ H ₉ NO ₄	264	C ₁₄ H ₁₆ O ₅
224	C ₁₄ H ₂₄ S	244	C ₁₄ H ₂₈ O ₃	255	C ₁₅ H ₁₃ NO ₃	264	C ₁₅ H ₂₀ O ₄
228	C ₉ H ₈ O ₇	245	C ₁₃ H ₁₁ NO ₄	256	C ₁₀ H ₈ O ₈	264	C ₁₉ H ₂₀ O
230	C ₁₂ H ₆ O ₅	246	C ₉ H ₁₀ O ₆ S	256	C ₁₁ H ₁₂ O ₇	264	C ₁₆ H ₂₄ O ₃
232	C ₁₄ H ₁₆ O ₃	246	C ₂₀ H ₆	256	C ₁₅ H ₁₂ O ₄	266	C ₁₂ H ₁₀ O ₇
232	C ₁₂ H ₂₄ O ₄	246	C ₁₇ H ₁₀ S	256	C ₁₆ H ₁₆ O ₃	266	C ₁₆ H ₁₀ O ₄
234	C ₁₂ H ₁₀ O ₅	246	C ₁₃ H ₁₀ O ₅	256	C ₁₄ H ₂₄ O ₄	266	C ₂₀ H ₁₀ O
234	C ₁₁ H ₁₀ N ₂ O ₄	246	C ₁₄ H ₁₄ O ₄	256	C ₁₉ H ₂₈	266	C ₁₃ H ₁₄ O ₆
235	C ₁₄ H ₂₁ NO ₂	246	C ₁₅ H ₁₈ O ₃	256	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	266	C ₁₄ H ₁₈ O ₅
236	C ₁₀ H ₄ O ₅ S	247	C ₁₂ H ₉ NO ₅	257	C ₁₃ H ₇ NO ₅	266	C ₁₅ H ₂₂ O ₄
236	C ₁₁ H ₈ O ₆	248	C ₁₀ H ₄ N ₂ O ₆	257	C ₁₄ H ₁₁ NO ₄	266	C ₁₆ H ₂₆ O ₃
236	C ₁₂ H ₁₂ O ₅	248	C ₁₂ H ₈ O ₆	258	C ₁₃ H ₆ O ₆	267	C ₁₅ H ₉ NO ₄
236	C ₁₄ H ₂₀ O ₃	248	C ₁₃ H ₁₂ O ₅	258	C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O ₆	267	C ₁₅ H ₂₅ NO ₃
238	C ₁₀ H ₆ O ₇	248	C ₁₀ H ₁₆ O ₇	258	C ₁₅ H ₁₄ O ₄	268	C ₁₁ H ₈ O ₈
238	C ₁₁ H ₁₀ O ₆	248	C ₁₄ H ₁₆ O ₄	258	C ₁₆ H ₁₈ O ₃	268	C ₁₅ H ₈ O ₅
238	C ₁₄ H ₁₀ N ₂ O ₂	249	C ₁₁ H ₇ NO ₆	259	C ₁₃ H ₉ NO ₅	268	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₄ S
238	C ₁₆ H ₁₄ O ₂	249	C ₉ H ₁₅ NO ₇	260	C ₁₀ H ₁₂ O ₆ S	268	C ₁₆ H ₁₂ O ₄
238	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃	250	C ₁₂ H ₁₀ O ₆	260	C ₁₂ H ₈ N ₂ O ₅	268	C ₁₃ H ₁₆ O ₆
238	C ₁₄ H ₂₂ O ₃	250	C ₁₃ H ₁₄ O ₅	260	C ₁₄ H ₁₂ O ₅	268	C ₁₀ H ₂₀ O ₆ S
238	C ₁₃ H ₂₂ N ₂ O ₂	250	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	260	C ₁₉ H ₁₆ O	268	C ₁₉ H ₂₄ O
239	C ₁₄ H ₉ NO ₃	251	C ₁₄ H ₂₁ NO ₃	260	C ₁₆ H ₂₀ O ₃	268	C ₁₆ H ₂₈ O ₃
268	C ₁₇ H ₃₂ S	277	C ₁₃ H ₁₁ NO ₆	284	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	293	C ₁₃ H ₁₁ NO ₇
269	C ₁₀ H ₇ NO ₈	277	C ₁₄ H ₁₅ NO ₅	285	C ₁₄ H ₇ NO ₆	294	C ₁₃ H ₁₀ O ₈
270	C ₁₀ H ₆ O ₉	277	C ₁₂ H ₂₃ NO ₆	285	C ₁₅ H ₁₁ NO ₅	294	C ₁₇ H ₁₀ O ₅
270	C ₁₁ H ₁₀ O ₈	278	C ₈ H ₁₀ N ₂ O ₇ S	285	C ₉ H ₁₉ NO ₉	294	C ₁₈ H ₁₄ O ₄
270	C ₁₄ H ₁₀ N ₂ O ₂ S	278	C ₁₃ H ₁₀ O ₇	286	C ₁₂ H ₁₄ O ₆ S	294	C ₁₅ H ₁₈ O ₆
270	C ₁₉ H ₁₀ O ₂	278	C ₁₀ H ₁₄ O ₇ S	286	C ₁₉ H ₁₀ O ₃	294	C ₁₆ H ₂₂ O ₅
270	C ₁₂ H ₁₄ O ₇	278	C ₁₇ H ₁₀ O ₄	286	C ₁₄ H ₂₂ O ₄ S	295	C ₁₆ H ₉ NO ₅
270	C ₁₆ H ₁₄ O ₄	278	C ₁₄ H ₁₄ O ₆	286	C ₁₈ H ₂₂ O ₃	295	C ₁₀ H ₁₇ NO ₇ S
270	C ₁₇ H ₁₈ O ₃	278	C ₂₂ H ₁₄	286	C ₁₇ H ₂₂ N ₂ O ₂	295	C ₁₇ H ₁₃ NO ₄
270	C ₁₄ H ₂₂ O ₅	278	C ₁₅ H ₁₈ O ₅	286	C ₁₉ H ₂₆ S	295	C ₂₁ H ₂₉ N
271	C ₁₄ H ₉ NO ₅	278	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	286	C ₁₉ H ₂₆ O ₂	296	C ₁₂ H ₈ O ₉
271	C ₁₅ H ₁₃ NO ₄	278	C ₁₇ H ₂₆ OS	287	C ₁₄ H ₉ NO ₆	296	C ₁₃ H ₁₂ O ₈
272	C ₁₈ H ₁₂ N ₂ O	279	C ₁₆ H ₉ NO ₄	287	C ₁₅ H ₁₃ NO ₅	296	C ₂₁ H ₁₂ S
272	C ₁₆ H ₁₆ O ₄	280	C ₁₂ H ₈ O ₈	287	C ₁₇ H ₂₁ NO ₃	296	C ₁₄ H ₁₆ O ₇
272	C ₁₇ H ₂₀ O ₃	280	C ₁₆ H ₈ O ₅	288	C ₁₃ H ₈ N ₂ O ₆	296	C ₁₈ H ₁₆ O ₄
272	C ₁₈ H ₂₄ S	280	C ₁₃ H ₁₂ O ₇	288	C ₁₈ H ₂₄ O ₃	296	C ₁₅ H ₂₀ O ₄ S
272	C ₁₅ H ₂₈ O ₂ S	280	C ₁₇ H ₁₂ O ₄	289	C ₁₃ H ₇ NO ₇	296	C ₁₅ H ₂₀ O ₆
272	C ₁₅ H ₂₈ O ₄	280	C ₁₄ H ₁₆ O ₆	289	C ₁₈ H ₁₁ NOS	296	C ₁₆ H ₂₄ O ₅
272	C ₁₆ H ₃₂ O ₃	280	C ₁₁ H ₂₀ O ₈	289	C ₁₄ H ₁₁ NO ₆	296	C ₁₇ H ₂₈ O ₄
273	C ₁₄ H ₁₁ NO ₅	280	C ₁₅ H ₂₀ O ₅	289	C ₁₅ H ₁₅ NO ₅	296	C ₁₈ H ₃₂ O ₃
273	C ₁₁ H ₁₅ NO ₇	280	C ₁₆ H ₂₄ O ₄	290	C ₁₀ H ₁₀ O ₈ S	297	C ₁₅ H ₇ NO ₆
273	C ₁₆ H ₁₉ NO ₃	280	C ₁₇ H ₂₈ O ₃	290	C ₁₄ H ₁₀ O ₅ S	297	C ₁₆ H ₁₁ NO ₃ S

Окончание таблицы

<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>
274	C ₁₁ H ₁₄ O ₆ S	281	C ₁₅ H ₇ NO ₅	290	C ₁₁ H ₁₄ O ₇ S	297	C ₉ H ₁₅ NO ₈ S
274	C ₁₅ H ₁₄ O ₅	281	C ₁₆ H ₁₁ NO ₄	290	C ₂₁ H ₂₂ O	297	C ₁₆ H ₂₇ NO ₄
274	C ₁₁ H ₁₈ N ₂ O ₄ S	282	C ₁₁ H ₆ O ₇ S	290	C ₁₈ H ₂₆ O ₃	298	C ₁₅ H ₆ O ₇
274	C ₁₉ H ₁₈ N ₂	282	C ₁₂ H ₁₀ O ₈	291	C ₁₃ H ₉ NO ₇	298	C ₁₂ H ₁₀ O ₉
274	C ₁₇ H ₂₂ O ₃	282	C ₁₃ H ₁₄ O ₇	291	C ₁₇ H ₉ NO ₄	298	C ₈ H ₁₄ N ₂ O ₈ S
275	C ₁₃ H ₉ NO ₆	282	C ₁₇ H ₁₄ O ₄	291	C ₁₄ H ₁₃ NO ₆	298	C ₂₀ H ₁₀ O ₃
275	C ₁₄ H ₁₃ NO ₅	282	C ₁₈ H ₁₈ O ₃	291	C ₁₅ H ₁₇ NO ₅	298	C ₁₄ H ₁₈ O ₅ S
275	C ₁₅ H ₁₇ NO ₄	282	C ₁₆ H ₂₆ O ₄	292	C ₁₃ H ₈ O ₆ S	298	C ₁₈ H ₁₈ O ₄
275	C ₁₄ H ₂₉ NO ₄	282	C ₁₆ H ₃₀ N ₂ O ₂	292	C ₁₃ H ₈ O ₈	298	C ₁₅ H ₂₂ O ₆
276	C ₉ H ₈ O ₈ S	283	C ₁₃ H ₁₇ NO ₆	292	C ₁₀ H ₁₂ O ₈ S	298	C ₁₉ H ₂₂ O ₃
276	C ₁₃ H ₈ O ₇	284	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O ₄	292	C ₁₇ H ₈ O ₅	298	C ₁₆ H ₂₆ O ₅
276	C ₁₀ H ₁₂ O ₇ S	284	C ₁₇ H ₁₆ O ₄	292	C ₁₄ H ₁₂ O ₇	298	C ₁₇ H ₃₀ O ₄
276	C ₁₁ H ₁₆ O ₆ S	284	C ₁₈ H ₂₀ O ₃	292	C ₁₈ H ₁₂ O ₄	299	C ₁₇ H ₁₇ NO ₄
276	C ₁₁ H ₂₀ N ₂ O ₆	284	C ₁₆ H ₂₈ O ₄	292	C ₁₇ H ₂₄ O ₄	299	C ₁₅ H ₂₅ NO ₃ S
276	C ₁₇ H ₂₄ O ₃	284	C ₂₀ H ₂₈ O	292	C ₁₈ H ₂₈ O ₃		



Структуры лигандов из базы данных ChEMBL, брутто-формулы которых идентичны молекулярным компонентам, найденным в масс-спектрах ИЦР ПФ узких фракций ГВ, обладающих ингибирующей активностью в отношении β -лактамаз