



**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
ЗАПОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**НАУКОВЕ ТОВАРИСТВО СТУДЕНТІВ, АСПІРАНТІВ, ДОКТОРАНТІВ І
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ**

**ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ
ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ СТУДЕНТІВ ТА МОЛОДИХ ВЧЕНИХ
«ДОСЯГНЕННЯ СУЧАСНОЇ МЕДИЧНОЇ ТА
ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ НАУКИ – 2022»**

4 лютого 2022 року



ЗАПОРІЖЖЯ – 2022

ОРГКОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ:

ГОЛОВА ОРГКОМІТЕТУ:

ректор ЗДМУ, Заслужений діяч науки і техніки України, проф. Колесник Ю.М.

ЗАСТУПНИКИ ГОЛОВИ:

проректор з наукової роботи, Заслужений діяч науки і техніки України, проф. Туманський В.О.;

голова Координаційної ради з наукової роботи студентів, проф. Бєленічев І.Ф.;

голова наукового товариства студентів, аспірантів, докторантів і молодих вчених, проф. Павлов С.В.;

секретар Координаційної ради з наукової роботи студентів, ст. викл. Абросімов Ю.Ю.;

голова студентської ради ЗДМУ Федоров А.І.

ЧЛЕНИ ОРГКОМІТЕТУ:

заступник голови студентської ради Будагов Р.І.; голова навчально-наукового сектору студентської ради Єложенко І.Л.

ЕЛЕКТРОННО-ТОПОЛОГІЧНИЙ ПІДХІД ДО ВІРТУАЛЬНОГО ЦІЛЕСПРЯМОВАНОГО СКРИНІНГУ ФАРМАКОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ У РЯДУ ХІМІЧНИХ СПОЛУК

Москаленко А.В.

Науковий керівник: ас. Риженко В.П.

Кафедра медичної та фармацевтичної інформатики і новітніх технологій
Запорізький державний медичний університет

Розробка та створення молекул із заданими фармакологічними властивостями та низькою токсичністю, цілеспрямований пошук різних видів біологічної активності у рядах хімічних сполук має першочергове значення для сучасної фармакології та фармації. Для пошуку фармакологічно активних речовин використовуються різні підходи, наприклад нейрохімічні, біофізичні, методи протеоміки, класичний QSAR, математичне моделювання фізіологічних процесів. Тому в даний час початковим етапом пошуку фармакологічно активних речовин, як правило, є використання доекспериментальних методів *in silico*, які передують експериментальним дослідженням *in vitro* та *in vivo*. Для цих цілей

розроблені спеціалізовані інформаційні технології та на їх основі створені інтегровані системи та програмні середовища. Незважаючи на численні роботи, присвячені дослідженню цієї галузі, у наукових дослідженнях, що базуються на комп'ютерних програмах прогнозу біологічної активності хімічних сполук, досліднику доводиться стикатися з необґрунтованим і навіть некоректним вибором ознак активності досліджуваних речовин. Насамперед у сучасних програмах відсутній диференційований прогноз антиоксидантної активності хімічних сполук за активними формами кисню та азоту. У цих комп'ютерних програмах підхід підпорядкований одній меті – отриманню високих значень коефіцієнтів кореляції, що призводить до створення за висловом Hansch С. «математичних виродків», які мають нічого спільного з об'єктом чи процесом дослідження. Усе сказане вище доводить оптимізацію цілеспрямованого пошуку біологічно активних сполук засобами програмного забезпечення. Застосування фізичних та фізико-хімічних параметрів сполук у поєднанні з різними обчислювальними методами, що базуються на скринінгових методах *in vitro*, дозволяє встановити закономірності різних видів активності у різних хімічних сполук на основі дослідження порівняно невеликого ряду їх похідних та розробити оптимальну програму прогнозу. Надалі електронно-топологічний підхід, заснований на конформаційних та квантово-хімічних розрахунках, дозволяє проводити дослідження щодо відбору ознак активності для великого масиву сполук.