

Голуб Е. С.

**МЕТОД «КОЛИЧЕСТВЕННОЕ СООТНОШЕНИЕ СТРУКТУРА-СВОЙСТВА»
КАК ИНСТРУМЕНТ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА**

Научные руководители: канд. биол. наук, доц. Бордина Г. Е., ассист. Гавриленко Д. А.

Кафедра химии

ФГБОУ ВО Тверской ГМУ Минздрава России, г. Тверь

На сегодняшний день поиск новых лекарственных веществ - задача нетривиальная из-за сложности структуры соединений, которые должны строго отвечать критериям эффективности и безопасности (т.е. побочные эффекты должны быть минимальны при максимальных биодоступности и аффинности к целевым молекулам). Кроме того, биологически активные вещества должны обладать определенными фармакодинамическими и фармакокинетическими параметрами, которые от них требуют врачи и фармакологи. Ввиду трудоемкости и затратности как в экономическом, так и временном аспекте, лабораторный метод скрининга веществ отходит на второй план, уступая место программному обеспечению, которое при определенной мощности аппаратной части способно рассчитывать различные химические и физические параметры веществ (например, температуры кипения и плавления, плотность, растворимость, константа ионизации, поляризуемость, критическая концентрация мицеллообразования), а также их супрамолекулярные свойства (стабильность межмолекулярных комплексов, степень аффинности и другие).

На данный момент наиболее подходящим методом для данной задачи является поиск количественных соотношений “структура - свойство” (Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR)). Эта процедура основана на применении методов математической статистики и машинного обучения для построения моделей, которые позволяют по описанию структур химических соединений предсказать их свойства. При этом структура вещества описывается набором так называемых “дескрипторов”, которые являются исходными параметрами как вещества в целом, так и отдельных атомов в молекуле и даже принадлежащих атомам молекулярных орбиталей. В связи с тем, что параметрами молекулярных орбиталей являются квантово-химические величины, процесс компьютерной обработки соединений с высокой молекулярной массой сильно усложняется и замедляется. Для ускорения процедуры построения молекулы и определения необходимых свойств используются различные методы, каждый из которых обладает своими преимуществами и недостатками, но в связи со сравнительно высоким уровнем развития компьютерной техники популярность набирает использование искусственных нейронных сетей, что позволяет распределить вычисления на несколько компьютеров и повысить продуктивность программного обеспечения.

Использование метода QSAR позволяет производить моделирование различных химических соединений так, чтобы на основе полученной модели структуры можно было предсказать свойства данного вещества, как физико-химические, так и фармакологические. Процедура QSAR имеет большой потенциал, ограниченный на данный момент мощностью компьютерной техники