

*Ясинецкая Е. И.*

**ВЗАИМОСВЯЗЬ СТРУКТУРЫ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ  
ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ**

*Научный руководитель канд. хим. наук, доц. Кулишова Т. П.*

*Кафедра медицинской и фармацевтической химии*

*Донецкий национальный медицинский университет им. М. Горького, г. Донецк*

Одной из важных характеристик фармацевтических субстанций является биоактивность лекарственных веществ, которая обуславливается не только химическим строением, но и пространственным строением вещества. Химический состав субстанции должен соответствовать требованиям хорошей растворимости в воде, чтобы была возможность его переноса кровяным руслом. Некоторые лекарственные вещества должны иметь хорошую липофильность для проникновения через клеточные мембраны.

При создании лекарственного препарата необходимо учитывать как фактор растворимости, так и наличие химических группировок, обуславливающих терапевтический эффект. Фармацевтическая субстанция, кроме фармакофорной группы должна содержать гидрофильные и липофильные фрагменты, чтобы обеспечить ее перенос к соответствующему органу.

К настоящему времени определен ряд фармакофорных групп, которые будучи введены в молекулу потенциального фармацевтического препарата, могут придавать ему нужную биоактивность. Например, введение фенольной группировки придает антисептические свойства, карбамидный фрагмент способствует появлению снотворного эффекта. Однако, не всегда такие приемы являются абсолютными и нередко не могут обеспечить предполагаемый эффект.

При моделировании новых фармацевтических препаратов, имеющих хиральные центры, следует иметь в виду, что различные энантиомеры могут обладать различными, а иногда и противоположным биологическим действием. Например, лекарственный препарат талидомид, может иметь два оптических изомера, один из которых является хорошим транквилизатором и снотворным, а второй – приводит к рождению детей с уродливыми органами. Поэтому в случае зависимости биологической активности от хирального центра, он должен комплементарно ориентироваться на хиральном центре биорецептора, чувствительном к асимметрии препарата. Так, установлено, что левовращающий энантиомер кокаина почти в два раза более активен в качестве местного анестетика и в четыре раза менее токсичен, чем его правовращающий оптический изомер. В настоящее время среди поставляемых на фармацевтический рынок хиральных лекарственных веществ лишь 15 % производится в виде индивидуальных стереоизомеров, остальные – в виде рацематов или диастереоизомеров.

Таким образом, для получения потенциально биоактивных веществ направленного терапевтического действия нужно учитывать множество факторов, особенно важным из которых является структура основной фармацевтической субстанции.