

Заключение. Винкамин, винпоцетин и ницерголин не являются эффективными средствами для профилактики реперфузионного повреждения головного мозга и не могут рассматриваться в качестве основного терапевтического подхода при этой патологии. Полученные результаты обосновывают необходимость дальнейших исследований, направленных на поиск и разработку лекарственных средств для медикаментозной профилактики реперфузионного повреждения головного мозга после каротидной реваскуляризации.

Моисеенко И.А.¹, Попель К.Г.², Попель Г.А.^{1,2}, Коваленко А.А.²

¹Республиканский научно-практический центр «Кардиология», Минск, Беларусь

²Белорусский государственный медицинский университет, Минск, Беларусь

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ДИГИДРОПИРИДИНОВЫХ БЛОКАТОРОВ КАЛЬЦИЕВЫХ КАНАЛОВ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОЙ НЕЙРОЦИТОПРОТЕКЦИИ ПРИ КАРОТИДНОЙ РЕВАСКУЛЯРИЗАЦИИ

Maiseyenko I.¹, Popel K.², Popel H.^{1,2}, Kavalenka A.²

¹Republican Scientific and Practical Centre "Cardiology", Minsk, Belarus

²Belarusian State Medical University, Minsk, Belarus

AI-BASED ANALYSIS OF THE BIOLOGICAL ACTIVITY OF DIHYDROPYRIDINE CALCIUM CHANNEL BLOCKERS AS POTENTIAL AGENTS FOR PHARMACOLOGICAL NEUROCYTOPROTECTION IN CAROTID ARTERY REVASCULARIZATION

Введение. Синдром церебральной гиперперфузии после реваскуляризации сонных артерий остается одной из актуальных проблем современной сосудистой хирургии. В связи с отсутствием в настоящее время эффективных схем медикаментозной профилактики и лечения синдрома церебральной гиперперфузии, приоритетным направлением является поиск лекарственных средств, способных не только безопасно контролировать системную гемодинамику в периоперационном периоде, но и обладать нейроцитопротективным действием.

Цель. Провести анализ спектра биологической активности дигидропиридиновых блокаторов кальциевых каналов с использованием алгоритмов искусственного интеллекта и методов хемоинформатики.

Материалы и методы. Для исследования были выбраны нимодипин (UNII 57WA9QZ5WH – 2-methoxyethyl-1-methylethyl-2,6-dimethyl-4-(3-nitrophenyl)-1,4-dihydropyridin-3,5-dicarboxylat), лерканидипина гидрохлорид (UNII OА8TFX68PE – 1-[(3,3-diphenylpropyl)(methyl)amino]-2-methylpropan-2-yl methyl 2,6-dimethyl-4-(3-nitrophenyl)-1,4-dihydropyridine-3,5-dicarboxylate hydrochloride (1:1)), нифедипин (UNII I9ZF7L6G2L – dimethyl 2,6-dimethyl-4-(2-nitrophenyl)-1,4-dihydro-3,5-pyridinedicarboxylate) и амлодипина безилат (UNII 864V2Q084H – 3-ethyl 5-methyl 2-[(2-aminoethoxy)methyl]-4-(2-chlorophenyl)-6-methyl-1,4-dihydro-3,5-pyridinedicarboxylate benzenesulfonate (1:1)). Прогнозирование биологических эффектов молекул выполнялось в специализированной системе компьютерной оценки биологической активности химических соединений с использованием алгоритмов машинного обучения. После загрузки структурных данных молекулы выполнено преобразование их в набор молекулярных дескрипторов, описывающих топологические и электронные характеристики соединения. В результате были получены значения вероятности проявления активности (P_a) и вероятности ее отсутствия (P_i). Значения $P_a > 0,7$ рассматривались как высокая вероятность проявления соответствующей активности.

Результаты. В ходе анализа спектра биологической активности дигидропиридиновых блокаторов кальциевых каналов с использованием алгоритмов искусственного интеллекта и хемоинформатики были получены следующие данные.

Биологические эффекты нимодипина: Vasodilator, coronary ($P_a=0,979$, $P_i=0,002$), Calcium antagonist ($P_a=0,939$, $P_i=0,001$), Vasodilator ($P_a=0,927$, $P_i=0,003$), Vasodilator, peripheral ($P_a=0,926$, $P_i=0,003$), Antihypertensive ($P_a=0,920$, $P_i=0,004$), Calcium channel (voltage-sensitive) blocker ($P_a=0,847$, $P_i=0,002$), Membrane permeability inhibitor ($P_a=0,811$, $P_i=0,008$), Antiischemic ($P_a=0,804$, $P_i=0,004$), Antiischemic, cerebral ($P_a=0,762$, $P_i=0,019$).

Биологические эффекты лерканидипина гидрохлорида: Vasodilator, coronary ($P_a=0,968$, $P_i=0,003$), Vasodilator ($P_a=0,905$, $P_i=0,004$), Calcium channel (voltage-sensitive) blocker ($P_a=0,888$, $P_i=0,001$), Antihypertensive ($P_a=0,787$, $P_i=0,005$), Antianginal ($P_a=0,762$, $P_i=0,005$), Antiischemic ($P_a=0,730$, $P_i=0,005$), Antianginal ($P_a=0,757$, $P_i=0,006$), Vasodilator, peripheral ($P_a=0,720$, $P_i=0,008$).

Биологические эффекты нифедипина: Antihypertensive ($P_a=0,965$, $P_i=0,004$), Vasodilator, coronary ($P_a=0,907$, $P_i=0,003$), Antiischemic ($P_a=0,874$, $P_i=0,004$), Vasodilator, peripheral ($P_a=0,847$, $P_i=0,004$), Myocardial ischemia treatment ($P_a=0,838$, $P_i=0,004$), Vasodilator ($P_a=0,828$, $P_i=0,004$), Antianginal ($P_a=0,809$, $P_i=0,005$), Membrane permeability inhibitor ($P_a=0,797$, $P_i=0,010$), Acute neurologic disorders treatment ($P_a=0,764$, $P_i=0,012$), Fusarinine-C ornithinesterase inhibitor ($P_a=0,730$, $P_i=0,017$).

Биологические эффекты амлодипина безилата: Antihypertensive ($P_a=0,915$, $P_i=0,004$), Membrane integrity agonist ($P_a=0,915$, $P_i=0,008$), Vasodilator, coronary ($P_a=0,906$, $P_i=0,003$), Vasodilator ($P_a=0,874$, $P_i=0,004$), Calcium channel (voltage-sensitive) blocker ($P_a=0,829$, $P_i=0,002$), Antiischemic, cerebral ($P_a=0,777$, $P_i=0,017$), Myocardial ischemia treatment ($P_a=0,751$, $P_i=0,004$).

Материалы IX Съезда кардиологов, кардиохирургов,
рентгеноэндоваскулярных хирургов и аритмологов Республики Беларусь

Заключение. По данным проведенного интеллектуального анализа спектра биологической активности нимодипин, лерканидипина гидрохлорид, нифедипин и амлодипина безилат обладают нейроцитопротективным действием и могут быть использованы для профилактики и лечения реперфузионного повреждения головного мозга после каротидной реваскуляризации.

МЕЖДУНАРОДНЫЙ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

КАРДИОЛОГИЯ

в Беларуси

2026, том 18, № 1. Приложение

Cardiology in Belarus

International Scientific Journal

2026 Volume 18 Number 1 Supplement



Густав Климт
Девы (1913)

**Материалы IX Съезда кардиологов,
кардиохирургов, рентгеноэндоваскулярных хирургов
и аритмологов Республики Беларусь**

Минск, 9–10 апреля 2026 года

ISSN 2072-912X (print)
ISSN 2414-2131 (online)



ПИ
ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЕ
ИЗДАНИЯ