

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
КАФЕДРА ПРОПЕДЕВТИКИ ВНУТРІШНЬОЇ МЕДИЦИНИ №1,  
ОСНОВ БІОЕТИКИ ТА БІОБЕЗПЕКИ  
КАФЕДРА ЕПІДЕМІОЛОГІЇ  
КАФЕДРА ПРОПЕДЕВТИКИ ВНУТРІШНЬОЇ МЕДИЦИНИ №2  
ТА МЕДСЕСТРИНСТВА



*Науково-практична конференція з міжнародною участю*

**«БІОЕТИКА ТА БІОБЕЗПЕКА:  
МУЛЬТИДИСЦИПЛІНАРНІ АСПЕКТИ»**

*присвячена 105-річчю пам'яті В.К. Високовича*

***Матеріали конференції***

м. Харків, Україна  
23-24 травня 2017 р.

## СТВОРЕННЯ НОВИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ В КОНТЕКСТІ БІОЕТИКИ ТА БІОБЕЗПЕКИ

Завада О.О.<sup>1</sup>, Журавель І.О.,<sup>2</sup> Макаров В.О.<sup>1</sup>, Лебединець В.О.<sup>3</sup>,  
Спиридонова Н.В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Харківський національний медичний університет

<sup>2</sup> Харківська медична академія післядипломної освіти

<sup>3</sup> Національний фармацевтичний університет, м. Харків

Розробка нових лікарських препаратів здійснюється спільними зусиллями науковців багатьох галузей, при цьому основна роль належить фахівцям у галузі хімії, фармакології, фармації. Відомо, що на кожному етапі життєвого циклу лікарського засобу, від створення нового фармацевтичного інгредієнту до утилізації препаратів, актуальними постають питання біоетики та біобезпеки, а саме забруднення навколишнього середовища хімічними реагентами, на стадії синтезу біологічно активних сполук (БАР); залучення лабораторних тварин, під час клінічних досліджень; проблеми якості лікарських засобів, їх утилізація та інші.

Слід зазначити, що сьогодні ефективним інструментом створення нових біологічно активних сполук із заданими фармакологічними властивостями є віртуальний дизайн молекул та застосування теоретичних методів *in silico*. Методи хемогеноміки передбачають комплексне дослідження фізіологічної дії сполук та зменшення ризику залишити не виявленими важливі види фармацевтичної активності. Це дозволяє здійснювати прогноз біологічної активності без попереднього синтезу молекул, шляхом створення віртуальних бібліотек, що включають максимальну кількість можливих похідних досліджуваної структури. Одним із таких методів є комп'ютерна програма PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances), яка дає можливість оцінювати фармакологічні ефекти, механізми дії та специфічну токсичність сполуки. PASS на відміну від інших методів аналізу зв'язку «структура-активність» забезпечує прогнозування всього спектру активності сполуки, включаючи як основну дію, так і можливі побічні ефекти.

За допомогою методів комбінаторної хімії, які надають можливість синтезу сотень сполук на основі однієї хімічної схеми з використанням декількох технологічних операцій, в роботі нами досліджено можливість побудови комбінаторних бібліотек похідних 2-аміно/аміноалкілімідазолів та 3-ціано-6 фторхінолонів-4, за результатами віртуальних скринінгових процедур обрано молекули для синтезу та фармакологічних досліджень. Така методологія пошуку активних фармацевтичних інгредієнтів, а саме стратегія цілеспрямованого синтезу створення нових БАР (drug-design, або «раціональний дизайн ліків») є економічно вигідною та обґрунтованою, а також орієнтованою на захист довкілля.

Таким чином, було створено віртуальні бібліотеки, загальною кількістю більше 1000 сполук. За допомогою програми PASS здійснено прогноз фізіологічної активності речовин, лише сполуки лідери було синтезовано, а їх фармакологічна активність підтверджена експериментально.