

# СКРИНИНГ НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА СОВРЕМЕННОМ ЭТАПЕ РАЗВИТИЯ

*Андреенко К.А., студент; Абухаммаш Е.В., студент;  
Миронович Л.М., профессор*

Разработка лекарственных препаратов является довольно длительным, ресурсоемким и комплексным процессом, успех которого зависит от выбора стратегии. В настоящее время поиск новых лекарственных препаратов основан на скрининге *in vitro* огромного массива новых химических соединений по отношению к небольшому числу видов биологической активности, которая в дальнейшем оптимизируется путем синтеза новых аналогов.

Исторически сложились две важнейшие стратегии скрининга:

- новые соединения испытываются на одной или нескольких биомишенях, что позволяет обнаруживать закономерности зависимости между структурными особенностями молекул и их активностью («структура-свойство», SAR);

- химические соединения тестируются *in vivo* с использованием модельных систем, приближенных к живым организмам.

«Геномная революция», свершившаяся в конце XX столетия, привела к созданию «обратного» скрининга. В рамках концепции «обратного» скрининга одно или несколько соединений, обладающих доказанными фармакологическими эффектами, тестируются на большой панели биомишеней, соответствующих типу фармакологической активности, что является ключом к оценке его мишень-специфичной активности.

Создана компьютерная программа с использованием единого описания химической структуры и универсального математического алгоритма установления зависимостей «структура-активность», которая носит название PASS и прогнозирует 783 вида биологической активности.

Все большее развитие получает виртуальный скрининг, представляющий вычислительную процедуру и включающий автоматизированный просмотр базы данных химических соединений и отбор тех, для которых прогнозируется наличие желаемых свойств. Виртуальный скрининг основан на различных свойствах: знании пространственной структуры; структур лигандов; основанный на поиске фармакофоров; основанный на применении моделей, полученных в результате поиска количественных соотношений «структура-свойство». Скрининг постоянно развивается и совершенствуется, что дает возможность обнаружения фармакологической активности как во вновь синтезированных

соединений, так и соединений давно описанных.