

КОМП'ЮТЕРНЕ ПРОГНОЗУВАННЯ В ДОСЛІДЖЕННІ НОВИХ ВИДІВ АКТИВНОСТІ ЕТИЛМЕТИЛГІДРОКСИПІРИДИНУ

Дев'яткіна Н. М., Важнича О. М., Дев'яткін О. Є.

*Українська медична стоматологічна академія,
м. Полтава, Україна*

Кафедра експериментальної та клінічної фармакології

pharma.umsa.poltava@gmail.com

Вступ. Хемо- та фармакоінформаційний аналіз дозволяють передбачати ефекти нових речовин і водночас дають змогу підтвердити нові види активності відомих препаратів, що становить основу для їх репозиціонування. Було припущено, що таким шляхом можна пояснити окремі екстрацеребральні ефекти, які спостерігаються в експериментах з використанням етилметилгідроксипіридину. Ця молекула складає основу препарату мексидол, який в Україні виробляється як генерик армадин і застосовується в психоневрологічній та кардіологічній клініці. Мета роботи – здійснити аналіз структури етилметилгідроксипіридину за допомогою програми PASS way2drug.

Методи дослідження. Було створено структурну формулу етилметилгідроксипіридину у форматі Molfile. Її використали для ретроспективного комп'ютерного прогнозування за допомогою онлайн-системи PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances, <http://pharmaexpert.ru/passonline>), яка прогнозує понад 4000 видів біологічної активності на основі порівняння структурних формул сполук з середньою точністю 95 %. Спектр біологічної дії речовини за даною програмою виражається як перелік ефектів і механізмів дії, для яких значення вірогідності виявлення (Pa) і невиявлення (Pi) незалежні та перебувають у межах від 0 до 1.

Результати дослідження. У вивченої структури виявлено 125 видів біологічної активності, для яких вірогідність прояву перевищує 50 % (Pa від 0,905 до 0,500). Крім видів активності, які можна асоціювати з антиоксидантними і нейротропними властивостями структури етилметилгідроксипіридину, підтверджуються її кардіотропність, гепатотропність, вплив на гемопоез, гіполіпідемічна і протизапальна дія. Прогнозується також стимуляція функції нирок і протективні ефекти щодо шкіри та слизових оболонок. Водночас програма вказує лише 9 побічних ефектів, які можуть зустрічатися з високою вірогідністю (вище 70 %).

Висновки. Отже, ретроспективне комп'ютерне прогнозування дозволяє виявити певні нові ефекти відомих лікарських засобів, що показано на прикладі ядра препарату мексидол, і спрямувати увагу експериментаторів і клініцистів на ці нетрадиційні цілі.