

СИНТЕЗ ТА КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРОГНОЗ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ДЕЯКИХ ГІДРАЗОНІВ

Фалалєєва Т.В., Дістанов В.Б.

*Національний технічний університет
„Харківський політехнічний інститут”,
м. Харків*

В роботі розглянуті питання синтезу гідразонів та їх похідних, що можуть використовуватися в якості ефективних біологічно активних сполук різного призначення, а також в аналітичній хімії. Розглянуті прогнози біологічної активності похідних гідразонів та перспективність деяких з них, як вихідних сполук для направленої синтезу біологічно активних речовин.

Традиційно пошук нових біологічно-активних сполук і ліків базується на аналізі значних масивів досліджень, що дають можливість відбору з великої кількості сполук тільки малу частину.

В значній мірі такі дослідження оптимізуються із застосуванням спеціальних комп'ютерних програм.

З метою прогнозу біологічної активності нами синтезований ряд гідразонів.

Прогноз біологічної активності синтезованих гідразонів проведений з використанням програмного комплексу PASS C&T (Prediction of Activity Spectra for Substances: Complex & Training), що містить масив даних більш 30000 біологічно-активних речовин з відомою біологічною активністю, і охоплює більше 400 фарма-кологічних ефектів, механізмів дії, а також мутагенність, канце-рогенність, тератогенність та ембріотоксичність. Середня точність прогнозу за допомогою PASS C&T становить близько 84 %.

Результати прогнозу, що видаються, крім назв активності містять у собі оцінки ймовірностей наявності (P_a), і відсутності кожної активності (P_i), що мають значення від 0 до 1.

Метою нашого дослідження є пошук базових структур для лікарських засобів, що являють собою елементи новизни та мають бажані показники селективної дії, для яких $P_a < 0,7$.

Прогноз біологічної активності показав, що синтезовані гідразони в більшості проявляють себе як стимулятори виділення сечової кислоти, діуретини, а також судинорозширюючі препарати, деякі з них мають протигіпертонічну дію, і є перспективними для подальшого дослідження.