

# ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ В ХЕМОІНФОРМАТИЦІ; АСПЕКТИ ВИКОРИСТАННЯ ПЛАТФОРМИ CHEMAXON У МЕДИЧНОЇ ХІМІЇ

В.О. Зубков<sup>а</sup>, О.Л. Каменецька<sup>а</sup>, Н.І. Руцак<sup>б</sup>

<sup>а</sup> *Національний фармацевтичний університет,*

Україна, 61002, Харків-2, вул. Пушкінська, 53

*E-mail: medchem@ukrfa.kharkov.ua*

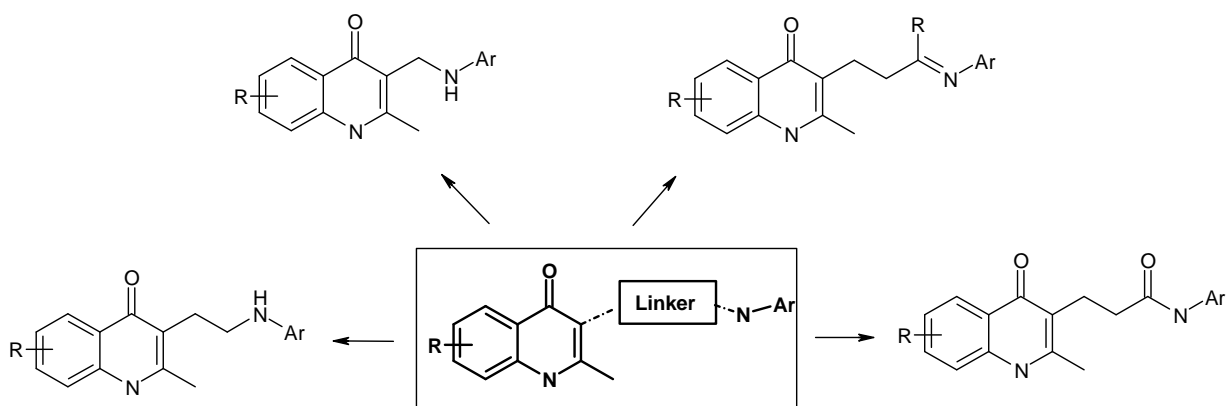
<sup>б</sup> *Івано-Франківський національний медичний університет*

76000, м. Івано-Франківськ, вул. Галицька, 2

Сучасний підхід до створення лікарських препаратів уже складно уявити без застосування різноманітних методів хемоінформатики в пошуку, практично на всіх його стадіях, нових потенційних БАР. Серед основних розробників комп'ютерних програм, що вирішують завдання хемоінформатики, особливе місце займає компанія ChemAxon (<http://www.chemaxon.com>), яка починаючи з 1998 року поступально розробляє багатофункціональну і кроссплатформенну середу, для генерації, зберігання, аналізу і обробки хімічної інформації. Особливу привабливість і популярність цієї системи серед кінцевих користувачів, а також розробників забезпечує також і гнучка ліцензійна політика компанії. Програмне забезпечення ChemAxon може бути вільно використовуватися в академічних дослідженнях і в навчальних процесах ВНЗ. Беручи це до уваги, нами був зроблений вибір на сторону хемоінформативної платформи компанії ChemAxon, як одного з основних інструментів комп'ютерної хімії в наших дослідженнях.

Раніше було встановлено, що похідні 3-аміноалкіл-2-метил-1Н-хінолін-4-онів є перспективними БАР нейротропного дії [1].

**Схема 1.**



Для планування та оптимізації синтезу нового масиву похідних 3-аміноалкіл-2-метил-1Н-хінолін-4-онів, була створена база віртуальних сполук (Схема 1), проведено серед них віртуальний скринінг і кластеризація а також оцінені можливі шляхи метаболізму окремих представників кластерів .

1. Скринінгові дослідження 3-амінометил-2-метил-хінолін-4-онів як потенційних психотропних засобів / С. Ю. Штриголь, В. О. Зубков, І. С. Гриценко, І. М. Подольський, О. В. Шатілов // Клінічна фармація. – 2010. – Т. 14, № 1.