



ПРЕЗИДІЯ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

ПОСТАНОВА

21.09.2022

м. Київ

№ 272

Хемоінформатика як ефективний інструмент
прогнозування і конструювання нових речовин
з комплексом необхідних властивостей

Заслухавши та обговоривши доповідь директора Фізико-хімічного інституту ім.О.В.Богатського НАН України члена-кореспондента НАН України В.Є.Кузьміна «Хемоінформатика як ефективний інструмент прогнозування і конструювання нових речовин з комплексом необхідних властивостей», Президія НАН України відзначає актуальність і високий рівень фундаментальних та прикладних наукових досліджень, спрямованих на аналіз зв'язків «структура – властивості», для цілеспрямованого створення нових сполук і матеріалів з комплексом заданих властивостей.

Протягом останніх 40 років виникла нова наукова дисципліна – «хемоінформатика», яка розв'язує різноманітні хімічні проблеми методами інформатики. Дослідження в цій галузі в Україні мають давні витоки та передумови. Зокрема, зі становленням хемоінформатики в нашій країні невід'ємно пов'язана постать академіка АН УРСР О.В.Богатського. Ще в 70-ті роки минулого століття з'явилися його роботи з використання математичних підходів для дослідження зв'язку «структура – біологічна активність» органічних речовин. Відтоді послідовно і систематично розробляється нова методологія досліджень, створюються необхідні програмні засоби, що реалізуються у вигляді цільових експертних систем, вирішуються різноманітні завдання, зокрема щодо зв'язку «структура – властивості».

Вагомим доробком науковців Фізико-хімічного інституту ім.О.В.Богатського НАН України є виявлення закономірностей впливу структури кількох тисяч органічних сполук на їх властивості – зокрема таких, як різні види біологічної активності. Для цього в інституті створено ієрархічну QSAR/QSPR технологію, спрямовану на оптимізацію процесу розроблення нових ефективних біологічно активних речовин, реагентів та матеріалів; розроблено універсальний

підхід щодо структурної інтерпретації QSAR/QSPR моделей для оцінювання внеску окремих молекулярних фрагментів у прояв органічними сполуками тих чи інших властивостей. Створено ефективний підхід для моделювання сумішей органічних сполук та прогнозу їхніх властивостей – температур кипіння, критичних параметрів та віріальних коефіцієнтів. Показано можливості прогнозу мікровластивостей, як-то параметри потенціалів міжмолекулярної взаємодії, на основі розрахунків макровластивостей сумішей речовин. Наразі розвивається новий науковий напрям – QSAR/QSPR наносистем, у рамках якого розроблено підхід для структурного опису різноманітних наночастинок, за допомогою якого можна надійно прогнозувати властивості наноматеріалів та різних молекулярних асоціатів.

Завдяки результатам фундаментальних досліджень у галузі хемоінформатики отримано низку прикладних розробок. Створено 12 комп'ютерних експертних систем для прогнозування властивостей органічних сполук та їх сумішей, зокрема різних видів токсичності та біодоступності, водної розчинності, ліпофільності та деяких термодинамічних властивостей – теплоти утворення та згорання. Ці експертні системи мають дружній інтерфейс, що дає можливість використовувати їх фахівцями різних галузей науки, які є потенційними споживачами моделей QSAR/QSPR. Зважаючи на необхідність розвитку оборонної тематики, пропонується на основі методів хемоінформатики розробити комп'ютерну експертну систему для прогнозування шкідливого впливу високоенергетичних сполук військового призначення на навколишнє середовище та організми людини та тварин.

У результаті плідного співробітництва Фізико-хімічного інституту ім.О.В.Богатського НАН України та Товариства з додатковою відповідальністю «Інтерхім» створено та впроваджено в медичну практику перші вітчизняні транквілізатори та імуностимулятори. Зараз проходить другу фазу клінічних випробувань новаторський анальгетичний засіб «Пропоксазепам», що гальмує гострий та хронічний біль і має полімодальний механізм дії. Деякі властивості діючої основи цього препарату (7-бром-5(о-хлорфеніл)-3-пропокси-1,2-дигідро-3H-1,4-бенздіазепін-2-он) успішно спрогнозовані на основі розроблених хемоінформатиками QSAR/QSPR моделей, реалізованих у вигляді експертних систем.

Дослідницький колектив хемоінформатиків Фізико-хімічного інституту ім.О.В.Богатського НАН України має високий міжнародний авторитет, а географія співпраці та кооперації охоплює наукові центри 14 країн зарубіжжя. Також за грантами міжнародних наукових фондів (ISF, INTAS, STCU, FP7) виконано 11 проєктів.

Водночас Президія НАН України відзначає, що розвиток зазначеного напрямку ускладнюють певні проблеми. Зокрема, насамперед потрібно розширити та поглибити роботи з конструювання та

оптимізації структури нових ефективних лікарських речовин (потенційних антивірусних та протипухлинних препаратів, імуностимуляторів, засобів лікування психічних розладів) і різноманітних речовин та матеріалів військового призначення. Конче необхідна більш глибока та активна координація наукових досліджень щодо зв'язків «структура – властивості».

Президія НАН України постановляє:

1. Доповідь члена-кореспондента НАН України В.Є.Кузьміна «Хемоінформатика як ефективний інструмент прогнозування і конструювання нових речовин з комплексом необхідних властивостей» взяти до відома.

2. Фізико-хімічному інституту ім.О.В.Богатського НАН України активізувати наукову співпрацю з Товариством з додатковою відповідальністю «Інтерхім» у рамках асоціації учасників наукової та інноваційної діяльності в галузі медичної та фармацевтичної хімії «Медфармхім», зокрема щодо хемоінформаційних досліджень.

3. Координаційній раді НАН України з проблеми «Наукові основи створення лікарських препаратів» активізувати роботу зі створення нових потенційних лікарських засобів, організації наукових конференцій та семінарів, поширення міжнародних наукових зв'язків, сприяння організації підготовки кадрів за спеціальністю «хемоінформатика» у закладах вищої освіти хімічного та хіміко-фармацевтичного профілю.

4. Відділенню хімії НАН України сприяти більш широкому проведенню наукових досліджень у галузі хемоінформатики в установах відділення.

5. Контроль за виконанням цієї постанови покласти на Відділення хімії НАН України та Науково-організаційний відділ Президії НАН України.

Президент
Національної академії наук України
академік НАН України

В.о.головного вченого секретаря
Національної академії наук України
академік НАН України



Анатолій ЗАГОРОДНІЙ

Вячеслав БОГДАНОВ