

**Автоматизація розрахунків квантово-фармакологічних параметрів молекул лікарських засобів за допомогою програми hyperchem**

*Небесна Т.Ю., провізор-інтерн, Радченко М.С., студ. 3-го курсу  
Наукові керівники: член-кор. НАН і АМН України, проф. Чекман І.С.,  
д-р мед.наук, проф. Яценко В.П.*

*Національний медичний університет ім. О.О. Богомольця,  
кафедра фармакології з курсом клінічної фармакології.  
Національний технічний університет України «КПІ»,  
кафедра медичної кібернетики та телемедицини*

Розрахунки квантово-фармакологічних параметрів молекул лікарських засобів є надзвичайно ресурсо- та працездатними і потребують постійної участі дослідника. Особливо гостро ця проблема відчувається при необхідності обчислення параметрів великої кількості молекул. Метою даної роботи було створення засобу автоматизації розрахунків стандартного набору квантово-фармакологічних властивостей за допомогою програми HyperChem. Рішення було знайдене завдяки скриптовим мовам програмування HyperChem - Command Language, Tool Command Language/Toolkit. В результаті була написана програма QuickMeasurer, яка знизилася участь дослідника в процесі обчислення з двадцяти дій над однією молекулою до трьох. Для зручності запуску QuickMeasurer була вбудована в меню HyperChem у вигляді кнопки, натискання якої вмикає розрахунок за схемою: оптимізація геометрії молекули послідовно методами MM+, PM3 з використанням алгоритма Рібера-Полака. В результаті дослідник отримує такі характеристики молекули, як геометричні параметри, заряди на атомах, розподіл електростатичного потенціалу, дипольний момент, значення енергій вищої зайнятої та нижчої вільної молекулярних орбіталей, загальні енергетичні параметри молекули. Програма QuickMeasurer може бути використана широким колом дослідників при розрахунках залежності структура-активність для лікарських засобів.