Нейросеть предскажет перспективные способы доставки лекарств

22.03.2023

Ученые НИЯУ МИФИ с помощью нейросетей исследовали закономерности, взаимодействия различных лекарств с фторированными фуллеренами. Это поможет разработке наномедицинских препаратов, которые будут точечно доставляться к пораженным органам пациентов.

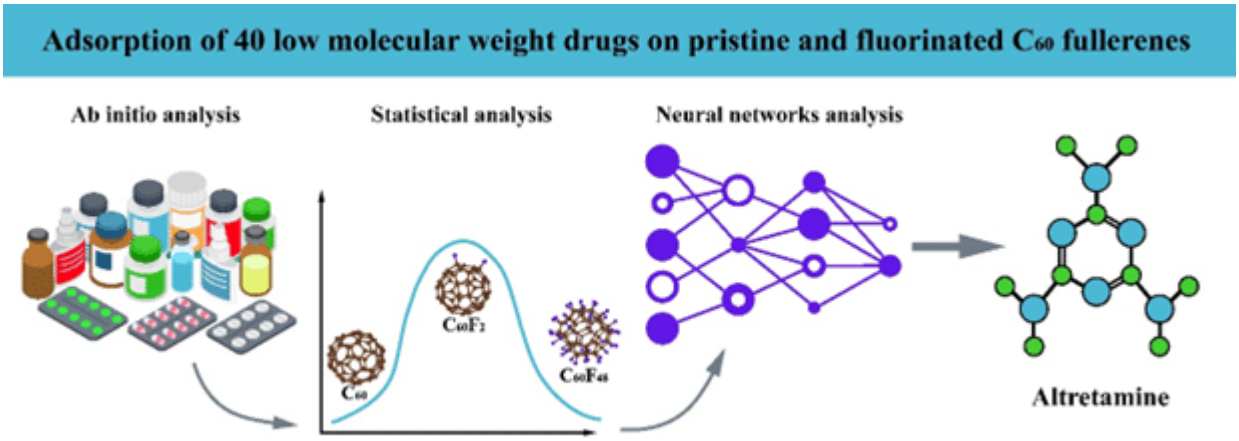


Нейросеть предскажет перспективные способы доставки лекарств / ©Getty images / Автор: Анастасия Кожевникова

Результаты исследования опубликованы в научном журнале Journal of Molecular Liquids. Фуллерены – шарообразные полые кластеры диаметром чуть меньше нанометра. Самый известный фуллерен C60 состоит из 60 атомов углерода и по своей структуре похож на футбольный мяч. Он известен с 1984 года, а в 1996 его открытие было отмечено Нобелевской премией по химии.

Исследования последних трех лет доказали, что фуллерен интересен не только химикам, но и медикам, так как он может адсорбировать многие противораковые лекарства, усиливать их активность в несколько раз и обеспечивать им лучшее проникновение в раковые клетки. При этом он совершенно не ядовит и легко выводится из организма.

Недорогой и хорошо воспроизводимый, по сравнению с другими наночастицами, синтез фуллерена сделал его распространенным «носителем» для доставки лекарств. Сфера его применения расширяется: теперь он доставляет лекарства не только от рака, но и от диабета, а также сердечно-сосудистых и респираторных заболеваний, включая коронавирусную инфекцию.



©Пресс-служба НИЯУ МИФИ

Фторированные фуллерены заслуживают особого внимания. Их легче отслеживать в организме при помощи ядерного магнитного резонанса, а еще они могут контролируемо выделять лекарства благодаря высокой активности в ближнем инфракрасном диапазоне. Однако несмотря на все преимущества фторированных фуллеренов, они не могут быть признаны универсальными носителями: одни лекарства могут эффективно доставляться на них, а другие – нет.

Исследовать взаимодействие каждого лекарства с фуллеренами слишком трудозатратно, на это не хватит никаких ресурсов, поэтому ученые НИЯУ МИФИ обратились к помощи квантово-химического моделирования и нейронных сетей, сообщил профессор НИЯУ МИФИ Константин Катин.

«Это позволило нам рассмотреть не одно-два лекарства, как обычно делается в подобных исследованиях, а сразу сорок популярных лекарств. Этого количества оказалось достаточно, чтобы провести статистический анализ: мы выявили «лидеров», «середнячков» и «аутсайдеров» среди лекарств (разумеется, речь идёт лишь об их способности доставляться на фуллеренах)», — рассказал он.

Чтобы сделать выводы об остальные лекарствах, включая те, которые еще только будут открыты в ближайшие годы, исследователи попытались установить закономерности, описывающие их взаимодействия с фуллеренами. Для этого они использовали, в том числе, нейронные сети, которые иногда могут находить неочевидные для человека закономерности.

«Обученная нами сеть может предсказывать, насколько надежно лекарство может быть «закреплено» на фуллерене. Ее точность ограничена, зато она работает очень быстро и совершенно бесплатно, что делает ее полезной по крайней мере для первичного анализа лекарств», — сообщил Константин Катин.

Также в ходе работы было обнаружено, что лучше всего связывается с фуллереном противораковый препарат алтретамин. Он используется уже больше 20 лет, но до сих пор не доставляется на фуллеренах. Авторы рассчитывают, что это будет исправлено вскоре после публикации их исследования.

Источник: сетевое издание Naked Science, 22 марта 2023 года, https://naked-science.ru/article/column/nejroset-predskazhet-pers