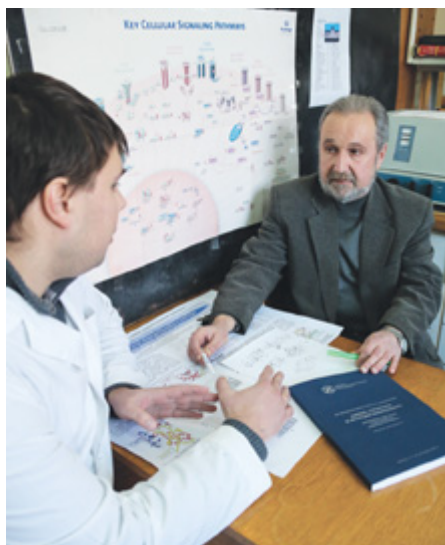


«СКИФ» против ВИЧ



УЧЕНЫЕ [Института биоорганической химии НАН Беларуси](#) серьезно приблизились к тому, чтобы создать принципиально новые лекарства против СПИДа. Эта работа в прошлом году была включена в десятку наиболее значимых научных достижений [академии](#).

Сложные теоретические исследования ученым-биохимикам удалось провести благодаря союзному суперкомпьютеру, установленному в [Объединенном институте проблем информатики НАН Беларуси](#). В 2009-2010 годах специалисты этих двух институтов сотрудничали при выполнении союзной научно-исследовательской программы "СКИФ-ГРИД". Содружество продолжается и сегодня. Выходит, суперкомпьютер стал для ученого-химика таким же незаменимым орудием труда, как микроскоп? Что это

дает? За ответом корреспондент "СОЮЗа" обратился к главному научному сотруднику лаборатории биофизики и биохимии нуклеопротеидов Института биоорганической химии НАН Беларуси, доктору химических наук Александру Андрианову, под руководством которого создаются прототипы лекарств будущего.

Вирус иммунодефицита человека ничтожно мал. Но это не значит, что он прост и примитивен. В действительности это сложная молекулярная структура, состоящая из сотен тысяч атомов.

Причем строение вируса постоянно меняется под воздействием внешних факторов, например, лекарств. Поэтому противовирусные препараты постепенно теряют активность. Как найти новые, более эффективные лекарственные средства? Над этим ломает голову весь научный мир. Однако пока в США официально зарегистрировано около 25 лекарственных средств, признанных действенными против СПИДа. Это очень мало, к тому же практически все они токсичны в отношении и без того ослабленного организма человека и весьма дорогостоящие. Ситуация может стать тупиковой, если не найти какое-то новое решение проблемы. И, похоже, белорусским ученым удалось его нащупать.

Известно, что у вируса есть петля V3, с помощью которой он и прикрепляется к здоровой клетке. Задача ученых - заблокировать этот важный фрагмент оболочки вируса, как это делают антитела, вырабатываемые в организме человека. Заманчиво создать аналогичные таким антителам лекарства. Проблема в том, что эта петля постоянно модифицируется. Соответственно, большинство антител теряют способность противостоять вирусу.

- Но мы предположили: у петли V3 должны быть не изменяющиеся участки, - поясняет Александр Андрианов. - Они-то и отвечают за прикрепление вируса к клетке в организме человека. С ними же взаимодействуют и антитела, нейтрализуя вирус.

Следовательно, нужно эти участки найти, а затем выявить химические соединения, которые могли бы имитировать функцию антитела и нейтрализовать вирус.

Если бы поиск велся традиционными методами, так сказать, в пробирке, на это ушли бы, наверное, многие годы. Современные биотехнологии строятся на применении кибернетических, то есть виртуальных методов. Причем персональным компьютером тут не обойдешься, нужны мощные суперкомпьютеры типа "СКИФ", созданного белорусскими и российскими учеными при выполнении одноименной союзной программы. В ходе одного только эксперимента, направленного на поиск аналога универсального антитела к вирусу иммунодефицита человека, белорусским химикам пришлось исследовать возможное взаимодействие белка оболочки вируса с 17 миллионами известных на сегодняшний день химических соединений. Даже при быстрой работе в миллиарды операций в секунду суперкомпьютеру пришлось месяц работать над решением задачи. Он выбрал соединение, которое в компьютерном эксперименте могло нейтрализовать петлю V3 вируса.

Впрочем, говорить о том, что новое лекарство уже найдено, было еще рано. Выявленное вещество оказалось нерастворимым в воде, поскольку содержало остаток жирной кислоты. Этот остаток с помощью все того же суперкомпьютера удалось заменить на нужные составляющие. Полученное химическое соединение явилось искусственным аналогом вещества, присутствующего в организме человека. Значит, его токсическое влияние будет умеренным. Противовирусное действие этого соединения впоследствии подтвердили медицинские эксперименты, проведенные в Республиканском научно-практическом центре эпидемиологии и микробиологии.

Пусть простят ученые автора этих строк за некоторые упрощения. Но как иначе рассказать о проникновении в самую суть микроорганизма, не прибегая к заумным формулам? По той же причине опустим несколько этапов теоретических исследований, проведенных белорусскими химиками в содружестве с математиками. Отметим лишь, что в 2012 году они с помощью суперкомпьютера сообща проверили вероятную противовирусную активность 12 потенциальных препаратов. Дни и недели суперскоростных вычислений показали, что 2-3 соединения могут быть эффективны против СПИДа. На их базе продолжится конструирование новых лекарственных форм.

- Это было бы невозможно без содействия наших коллег из Объединенного института проблем информатики, - отмечает Александр Андрианов. - Они не только участвовали в проведении компьютерных экспериментов на суперЭВМ, но и предоставили в наше распоряжение самое современное лицензионное программное обеспечение.

Мировое научное сообщество уже оценило прорыв, сделанный белорусскими биохимиками. На две их статьи в авторитетных международных журналах за год коллеги сделали в своих работах и докладах 65 ссылок! В этом году выйдет монография Александра Андрианова о новых методах компьютерного моделирования лекарств против СПИДа и других опасных болезней. Сам ученый считает, что антиВИЧ-агенты с новыми механизмами действия могут быть разработаны уже через 3-5 лет.

bibikov@sb.by

Автор публикации: Владимир БИБИКОВ

Фото: Виталий ГИЛЬ