

Zaburzenia depresyjne są jednymi z najbardziej rozpowszechnionych w społeczeństwie chorób. Według danych z 2006 roku, na nerwicę lub depresję cierpi 151 milionów osób na całym świecie, w tym 7.4% mieszkańców Polski, dając jej 6 miejsce w rankingu najczęstszych chorób przewlekłych. Dane te w pełni tłumaczą nie tylko mnogość dostępnych na rynku preparatów przeciwdepresyjnych, ale i zapotrzebowanie na opracowywanie skuteczniejszych i bezpieczniejszych w użyciu leków. Na szczególne uwagi w kwestii bezpieczeństwa stosowania leków przeciwdepresyjnych zasługuje fakt, iż jedna z najczęściej stosowanych grup tych leków (selektywne inhibitory wychwytu zwrotnego serotoniny, tzw. SSRI) podlega metabolizmowi w organizmie przy pomocy tych samych enzymów, które odpowiadają za metabolizm statyn, leków używanych w leczeniu hiperlipidemii. Hiperlipidemia, podobnie jak zaburzenia depresyjne, należy do często występujących schorzeń przewlekłych. Zatem podawanie razem leków przeciwdepresyjnych (z grupy SSRI) oraz statyn często doprowadza do zwiększenia częstości występowania działań niepożądanych, w wyniku interakcji między wymienionymi dwoma grupami leków. Prezentowane badanie ma na celu zbadanie 42 arylopiiperazyn (pochodnych Buspironu, leku o działaniu przeciwdepresyjnym i przeciwleukowym) będących potencjalnymi kandydatami na leki pod kątem ich bezpieczeństwa stosowania w terapii wielolekowej. Projekt zakłada wyznaczenie w warunkach *in vitro* wartości staenia związku powodującego przebieg reakcji enzymatycznej z połową prężności maksymalnej (IC<sub>50</sub>). Pozwala ona na oszacowanie, w jakim stopniu badany związek wpływa na aktywność enzymów odpowiadających za metabolizm innych grup leków, a więc innymi słowy – jak duże istnieje ryzyko interakcji badanych pochodnych z powszechnie stosowanymi grupami leków. Jednym z celów badania jest opracowanie szybkiej i rzetelnej procedury pozwalającej na wyznaczenie wartości IC<sub>50</sub> w warunkach laboratoryjnych. Uzyskane wyniki posłużą do stworzenia modelu matematycznego, który pozwoli na przewidywanie wartości IC<sub>50</sub> bez konieczności przeprowadzania skomplikowanych, drogich i czasochłonnych serii do wiadczeń. Porównanie wartości wyznaczonych dla szeregu związków pozwoli na oszacowanie ich bezpieczeństwa stosowania w terapii wielolekowej. Jedynymi niezbędnymi elementami będzie stworzona komputerowo struktura cząsteczki, oraz odpowiednia moc obliczeniowa komputera pozwalająca na przeprowadzenie zaawansowanych obliczeń na trójwymiarowym modelu.