

Bilgisayar ve
İnformasyon
Teknolojileri

BİLGİSAYAR DESTEKLİ
İLAÇ TASARIMI
(CADD)

RASYONEL İLAÇ ETKEN MADDESİ TASARIMI

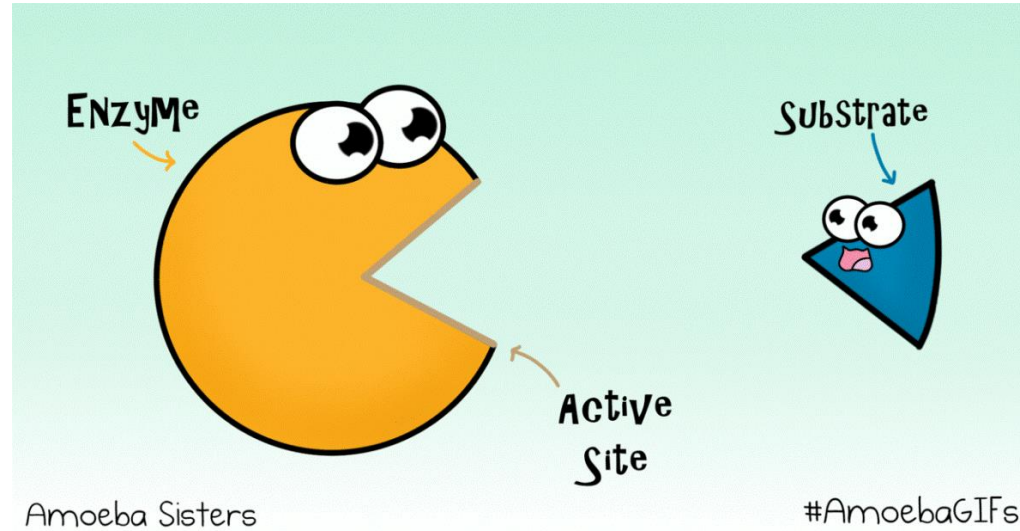
KAZANÇ

ZAMAN
EMEK
PARA

Mekanistik Tasarım

Hedef: Reseptörler, enzimler, nükleik asitler, iyon kanalları, hücre membranı

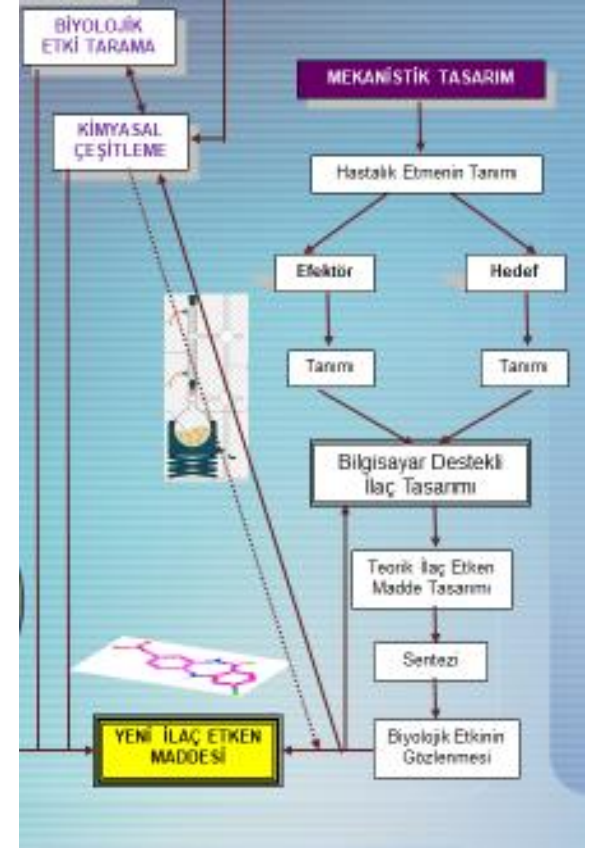
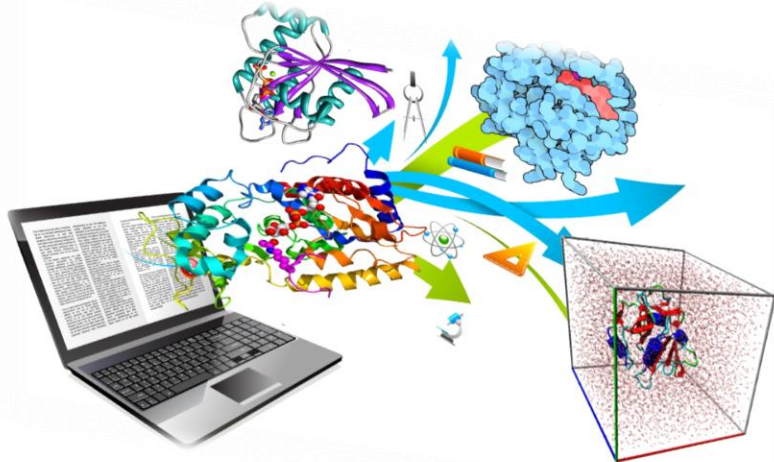
Efektör: Hedefin etkili yüzeyini işgal eden, hedefi olumlu ya da olumsuz etkileyen doğal endojen maddeler, ilaçlar, substratlar



Mekanizmaya Dayalı İlaç Tasarımı

Hastalıkla ilgili etmenin ve/veya hastalık-hedef-efektör üçgenindeki ilişkilerle ilgili bilgilerin araştırılıp, tanımlanarak açıklığa kavuşturulması ve elde edilen bu verilerin yeni ilaç etken maddesi bileşiklerin tasarım çalışmalarında kullanılması esasına dayanır.,

- ❁ Biyolojik yolak bilinmelidir.
- ❁ Tüm çalışmalar moleküler düzeyde gerçekleştirilir.
- ❁ Günümüzde ideal ilaç tasarım yöntemidir.



CADD' in YER ALDIĐI ÇALIŐMALAR



Bilgisayar Destekli İlaç Etken Madde Tasarımı

Rasyonel İlaç Tasarım Yöntemi

Uygulama Alanı

- **Farmakokinetik Faz**
- **Farmakodinamik Faz**



Bilgisayar Destekli İlaç Tasarımının Tarihi Gelişimi

- **1960'larda ... 1970'lerde ... Kantitatif Yapı-Etki İlişkileri (QSAR)**
İdeal önder bileşiğe ulaşmaya (lead optimization) odaklanma
- **1980'lerde ... Moleküler Modelleme (Molecular Modeling)**
Önder bileşik belirlenmesine (lead identification) odaklanma
- **1990'larda ... 3 Boyutlu Tarama, Molekül Yapısı Hedefli Tasarım (3D Searching, structure-based design)**
Önder bileşik belirlenmesine (lead identification) odaklanma
- **1990'ların sonunda... Kombinatoriyal Kimya (Combinatorial Chemistry), HTS (High throughput Screening)**
Çoklu önder bileşiklerin belirlenmesine odaklanma
- **2000'li yıllarda... Görsel HTS, ADME/Toksosite**
Aday Bileşiklerin Değerlendirilmesi (candidate evaluation)

