

# İLAÇ ETKEN MADDESİ TASARIM YÖNTEMLERİ

## ➤ EFEKTÖRE DAYALI İLAÇ TASARIMI

Efektörden hareket edilir

Efektörün yapısı bilinir

Ligantlar  
İlaç Etken Maddeleri

KEMOİNFORMATİK

## ➤ HEDEFE DAYALI İLAÇ TASARIMI

Hedeften hareket edilir

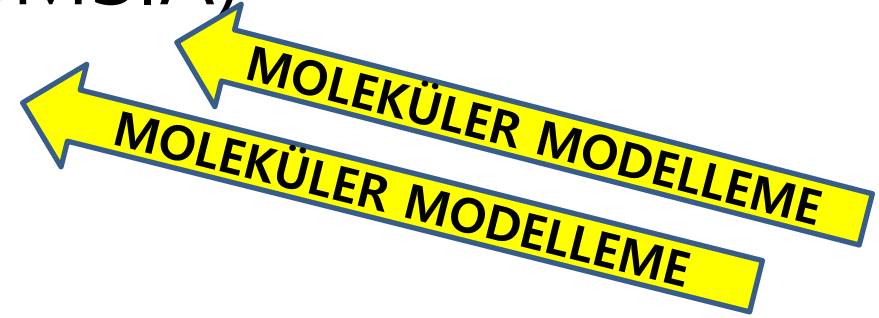
Hedefin yapısı bilinir

Reseptör, Enzim ve Nükleik Asit

BİYOİNFORMATİK

# ➤ EFEKTÖRE DAYALI İLAÇ TASARIMI

1. Geleneksel (2D) QSAR, QSPR
2. 3-D QSAR (CoMFA, CoMSIA)
3. Farmakofor Analizi



Kemoinformatik çalışmalar

# ➤ HEDEFE DAYALI İLAÇ TASARIMI

1. Doking Yöntemi

2. Fragmana Dayalı İlaç Tasarımı

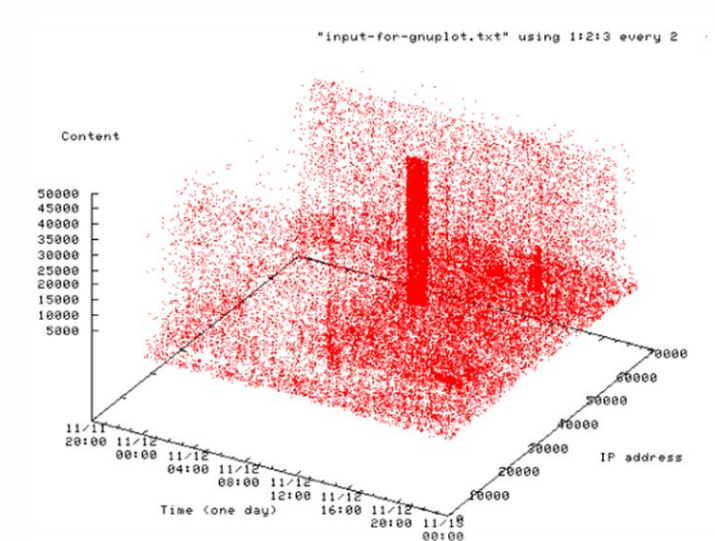
MOLEKÜLER MODELLEME

MOLEKÜLER MODELLEME

Biyoinformatik çalışmalar

# KANTİTATİF YAPI-ETKİ İLİŞKİLERİ (Quantitative Structure-Activity Relationship)QSAR)

Kimyasal bileşiklerin **moleküler nitelikleri** (yapısal / fizikokimyasal özellikleri) ile **biyolojik aktiviteleri** arasındaki ilişkileri matematiksel yöntemlerle tanımlama işlemleridir.



# QSAR

- @ Kimyasal yapı ile biyolojik aktivite arasında rol oynayan ilişkilerin tanımlanmasıyla ilgili kaynaklara geçen ilk çalışma 1863 yılında Fransa'da yapılmıştır. (A. Cros)
- @ Bu çalışmaya göre,  
"Araştırılan bazı alkollerin suda çözünürlüğü azaldıkça memeliler üzerindeki toksik etkilerinin arttığı " gözlemlenmiştir.

# QSAR'ın Amacı



- ⊙ Bir seri bileşik üzerinden geliştirilen yapı-etki ilişkileri analiz denklemi kullanılarak daha iyi etki gösterebilecek **yeni bir bileşiği tasarlamak,**
- ⊙ Var olan bir bileşiğin **toksitesini azaltmak,**
- ⊙ Seçilen bir bariyeri (örneğin kan-beyin bariyeri) geçmek için optimum lipofilik özelliğe sahip lider yapıyı **optimize etmek**