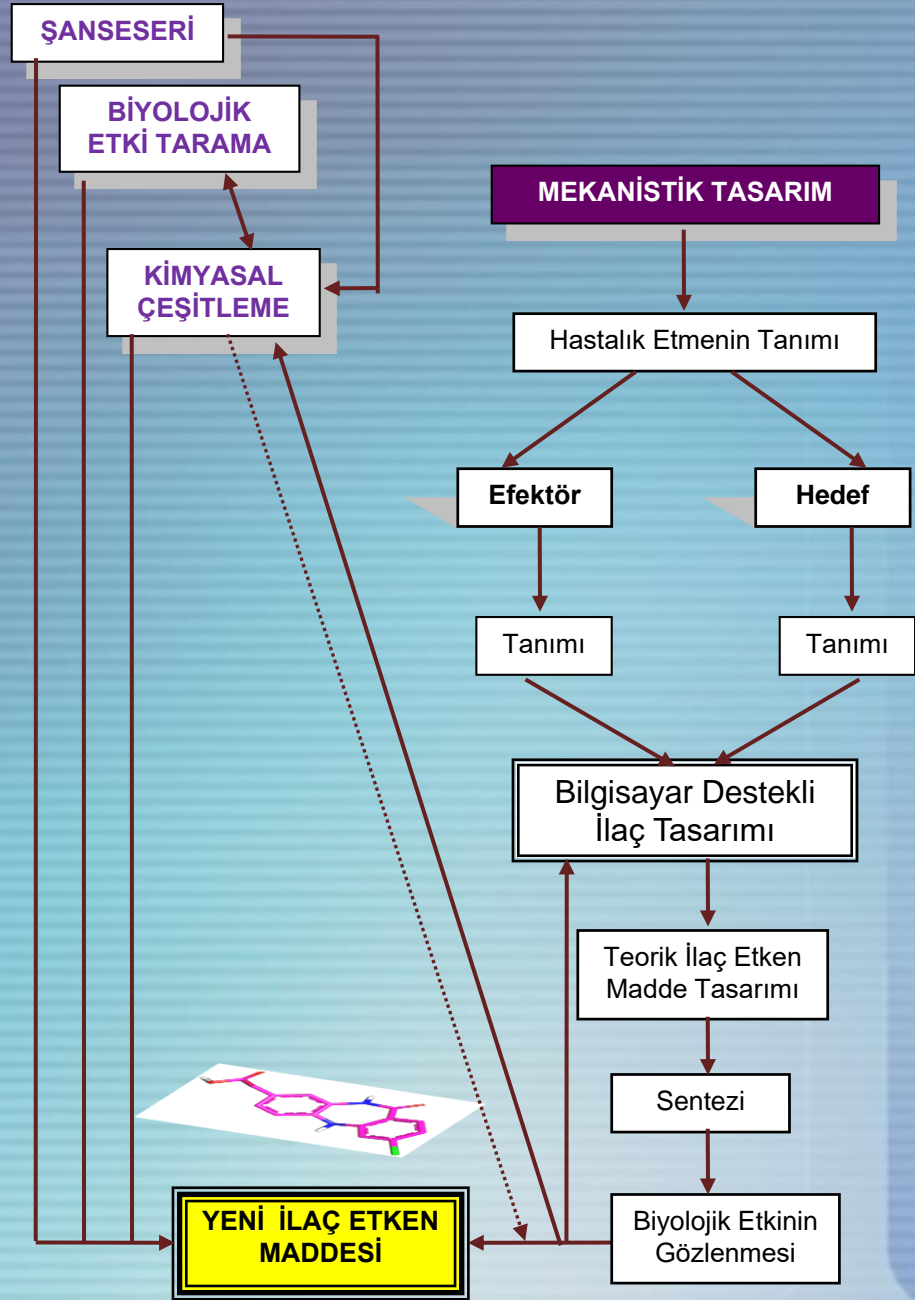




Bilgisayar Destekli İlaç Tasarımı



ilaç tasarımı;

Önceden tanımlanmış yapı-aktivite ilişkilerinden yararlanarak, farmakolojik aktivitesi öngörülebilir potansiyel ilaç moleküllerinin tasarlanmasıdır.

Yeni ilaç molekülleri geliştirmenin amacı;

- var olanlardan daha güçlü,**
- daha az toksik ve**
- yan etkileri en aza indirilmiş,**

yararlı terapötik bileşikler geliştirmektir.

Yeni bir ila etken maddesi geliřtirme;

- pahalı,
- zahmetli
- uzun bir sre

Onbine yakın bileřikten sadece bir tanesi ila olarak kullanıma girebilmektedir.

Bilgisayar Destekli İlaç Etken Madde Tasarımının Amaçları

Önder Bileşik Geliştirme, Belirleme (Lead Identification)

İstenilen terapötik kategoride güçlü biyolojik etki gösterebilecek yeni bileşiklerin tasarımı ve tanımlanması

İdeal Önder Bileşiğe Ulaşma (Lead Optimization)

Önder bileşiğin istenilen özelliklerinin artırılması, istenmeyen özelliklerinin azaltılması

**Bilgisayar ve
İnformasyon
Teknolojileri**

**BİLGİSAYAR DESTEKLİ
İLAÇ TASARIMI
(CADD)**

RASYONEL İLAÇ ETKEN MADDESİ TASARIMI

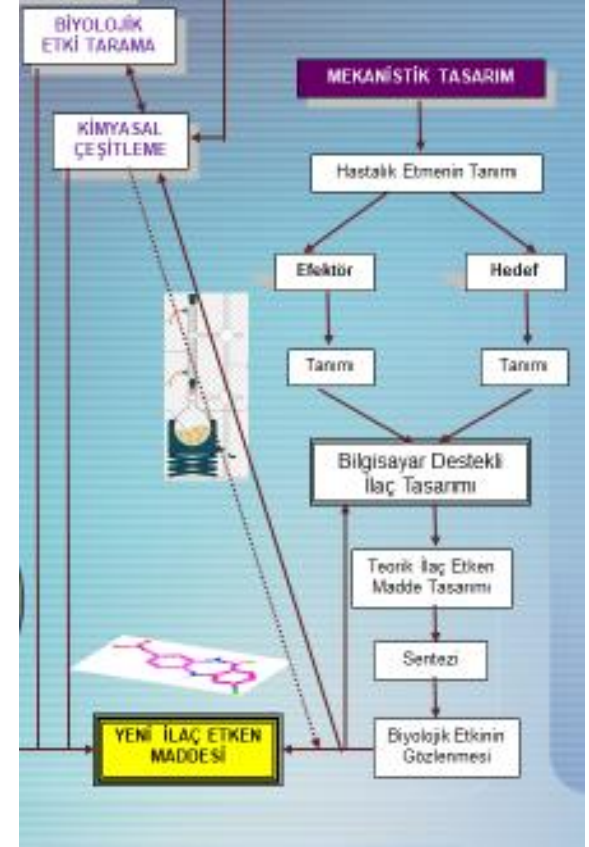
KAZANÇ

**ZAMAN
EMEK
PARA**

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.



Mekanizmaya Dayalı İlaç Tasarımı

- ❁ Hastalık etmeni, sebepleri ve organizmayı nasıl etkilediği ile ilgili gerekli bilgi birikiminin sağlanması.
- ❁ Problemin çözümü için yaklaşım geliştirilmesi (hedefin veya hastalık hedef-efektör üçgeninde yer alan bilgilerin araştırılması).
- ❁ Etki göstermeye aday öncü moleküler yapıların belirlenmesi ve geliştirilmesi.
- ❁ Belirlenen bu moleküler yapıların sentezlenmesi ve biyolojik aktivitelerinin gözlenmesi.
- ❁ Etkisi tanımlanan bu bileşiklerin yapı-etki ilişkilerinin analizlenerek, uygun ve yeterli aktivite gösterecek yeni önder moleküler yapı ve/veya yapıların tasarlanması.
- ❁ Yeni tasarlanan moleküllerin sentezlenmesi ve biyolojik aktivitelerinin gözlenmesi, teorik bazda varılan çözümlenin ***in vitro ve in vivo deney sonuçları ile kanıtlanması***

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)