

*Калинычев А. В.*

## **ВВЕДЕНИЕ В DRUG DESIGN**

*Научный руководитель канд. хим. наук, доц. Фандо Г. П.*

*Кафедра биоорганической химии*

*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

Drug design – это процесс, разработки и создания новых лекарственных препаратов с участием современной вычислительной техники и компьютерных программ по моделированию мишеней и способов взаимодействия с ними молекул активных веществ.

В настоящее время для разработки одного нового лекарственного вещества требуются немалые финансовые затраты, а период его создания, как правило, занимает не менее 10-15 лет. Основной принцип создания лекарственного вещества заключается в связывании молекулы лекарственного соединения с определёнными участками мишени и изменении работы последней, что положительным образом сказывается на ходе заболевания. Мишенью (белки и/или кодирующие их гены) является макромолекулярная биологическая структура, предположительно связанная с определенной функцией, нарушение которой приводит к заболеванию и на которую необходимо совершить определенное воздействие. Кроме того, многие заболевания являются мультифакторными, и их причина – это дисфункция сразу нескольких белков или генов, что существенно усложняет задачу. Разработка органических соединений, способных избирательно связываться с выбранными биологическими мишенями, является ключевым этапом для всего долгого и дорогого процесса создания лекарства.

Данный доклад дает базовое представление о создании лекарств. Рассмотрены основные понятия, термины и технологии, применяющиеся в сфере drug design. Особое внимание уделено роли вычислительной техники в этом наукоемком процессе. Описаны методы поиска и валидации биологических мишеней для лекарственных препаратов, высокопроизводительный скрининг, процессы клинических и доклинических испытаний лекарств, а также применение компьютерных алгоритмов.