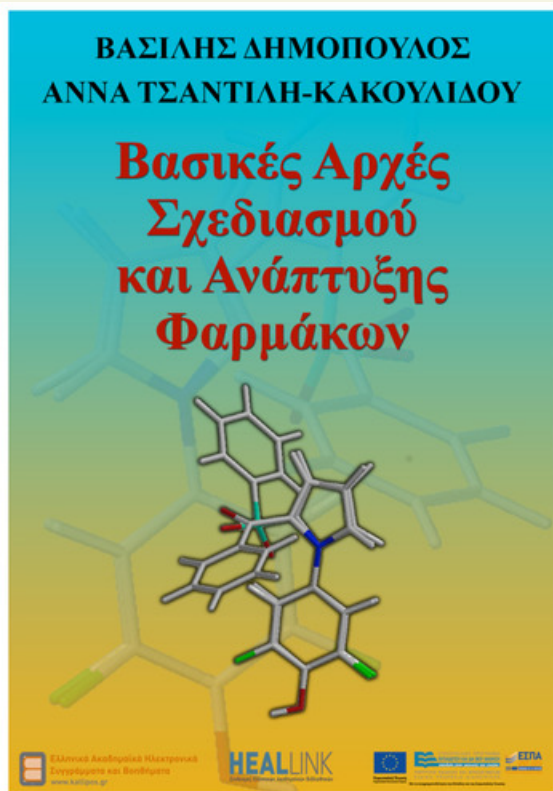




ΜΕΤΑΔΕΔΟΜΕΝΑ

Τίτλος: Βασικές Αρχές Σχεδιασμού και Ανάπτυξης Φαρμάκων

Υπότιτλος: -

Γλώσσα: Ελληνικά

ISBN: 978-960-603-190-8

Θεματικές Κατηγορίες: ΙΑΤΡΙΚΗ ΚΑΙ ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ ΥΓΕΙΑΣ, ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ ΖΩΗΣ, ΒΙΟΛΟΓΙΚΕΣ ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ, ΦΥΣΙΚΕΣ ΚΑΙ ΓΕΩΠΟΝΙΚΕΣ ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ

Λέξεις-κλειδιά: Σχεδιασμός φαρμάκων / Ενώσεις-οδηγοί / Βελτιστοποίηση ένωσης-οδηγού / Φαρμακο-ομοιότητα / Απορρόφηση Φαρμακομορίου

Βιβλιογραφική Αναφορά: Δημόπουλος, Β., & Τσαντίλη-Κακουλίδου, Α. (2015). Βασικές Αρχές Σχεδιασμού και Ανάπτυξης Φαρμάκων [Προπτυχιακό εγχειρίδιο]. Κάλιπος, Ανοικτές Ακαδημαϊκές Εκδόσεις. <http://dx.doi.org/10.57713/kallipos-466>

Περίληψη

Το βιβλίο θα περιλαμβάνει τις σύγχρονες τάσεις στο σχεδιασμό νέων φαρμακευτικών ουσιών. Ξεκινώντας από τα πρώτα στάδια σχεδιασμού για την ανακάλυψη νέων ενώσεων-οδηγών με συγγένεια σε συγκεκριμένο υποδοχέα-στόχο, θα επεκταθεί στο ρόλο των ιδιοτήτων ADME (Απορρόφηση, Κατανομή, Μεταβολισμός, Απέκκριση) και των φυσικοχημικών ιδιοτήτων έτσι ώστε να επιτυγχάνεται κατάλληλο φαρμακοκινητικό προφίλ. Θα αναπτυχθούν οι *in silico* τεχνικές στις οποίες βασίζεται ο σχεδιασμός με βάση τη δομή του υποδοχέα (structure-based drug design), με βάση τα προσδέματα (ligand-based drug design) και με βάση δομικά θραύσματα (fragment based drug design). Θα αναλυθούν οι κυριότερες στατιστικές τεχνικές ως εργαλεία για την εξαγωγή μοντέλων ποσοτικών σχέσεων δομής-δράσης. Θα συζητηθούν οι φυσικοχημικές και μοριακές ιδιότητες -λιποφιλία, ηλεκτρονιακές, στερεικές- που επηρεάζουν την πρόσδεση των μορίων στα μακρομόρια και τη διαπερατότητα των βιολογικών φραγμών. Ιδιαίτερη έμφαση θα δοθεί στη λιποφιλία

ως πρωταρχικής ιδιότητας στη δράση των φαρμάκων και το μέτρο με το οποίο εκφράζεται, το συντελεστή μερισμού ή κατανομής στο σύστημα οκτανόλης/νερού. Θα παρουσιαστούν οι τεχνικές για τον προσδιορισμό και τον υπολογισμό του συντελεστή μερισμού/κατανομής. Θα αναφερθούν οι άριστες τιμές λιποφιλίας για τη διαπερατότητα βιολογικών φραγμών, ενώ θα τονιστεί η αρχή της ελάχιστης λιποφιλίας. Θα εισαχθεί η έννοια της φαρμακο-ομοιότητας (drug-likeness) και θα παρουσιαστούν οι αντίστοιχοι μετρικοί κανόνες. Θα αναπτυχθεί επίσης ο ρόλος της στεροχημείας, των χηλικών ενώσεων και των προφαρμάκων στη βιολογική δράση. Επιπλέον, θα συζητηθεί η στρατηγική της πολλαπλής στόχευσης. Τέλος, θα αναφερθούν οι κυριότεροι αντι-στόχοι φαρμάκων και οι τεχνικές ελέγχου της πρόσδεσης των υποψηφίων φαρμακομορίων σε αυτούς. Συνοψίζοντας, το βιβλίο θα προσπαθήσει να καταδείξει την πολυπλοκότητα στην έρευνα για την ανάπτυξη νέων φαρμάκων και να αναδείξει το φάρμακο ως προϊόν υψίστης τεχνολογίας.

