

Szuperhősök a tudomány SZOLGÁLATÁBAN



GYÓGYSZERTER- VEZÉS

Az emberek sokféle betegségben szenvednek, amelyek közül néhány gyógyítható a már létező gyógyszerekkel, de vannak olyanok is, amelyek sajnos még nem. Sajnálatos módon egyes gyógyszerek, amelyeket már alkalmaznak bizonyos betegségek kezelésére, nem kellően hatékonyak és kellemetlen mellékhatásokkal járhatnak. Ezért nem meglepő, hogy a gyógyszerkutatás-fejlesztés mind az egyetemek, mind a gyógyszeripar számára igen kiemelt terület.

Egy új gyógyszer tervezése összetett és több tudományterületet is érintő feladat. Egy új gyógyszer forgalomba hozatalához több, mint 10 év tanulmányozás, kísérletezés és tesztelés is kellhet.

A **szuperszámítógépek** egyre fontosabb szerepet játszanak ebben a folyamatban. Bebizonyították, hogy képesek a lehetséges gyógyszerek körét leszűkíteni, ezáltal sok időt és költséget takaríthatunk meg a kísérleti tesztelés során. A legjobb jelölt beazonosítása helyett azért beszélhetünk a jelöltek körének leszűkítéséről, mert a számítógépek önmagukban még nem képesek feltérképezni a gyógyszerek kölcsönhatásainak összetettségét az emberi testben. A lehetséges gyógyszernek nemcsak hatékonyan kell a célzott betegséget kezelni, hanem a lehető legkevesebb mellékhatással kell járnia. Legyen kémiai és metabolikusan stabil, ne legyen toxikus (beleértve a metabolitjait), és sok más kedvező tulajdonsággal kell rendelkeznie például oldhatóság, sejtmembránokon való áthaladó képesség stb.



Egy tipikus, egy bizonyos betegséget célzó gyógyszertervezési folyamat ezeket a lépéseket követi: először azonosítani kell az ún.

biológiai célpontot. Ez jellemzően

egy fehérje receptor, **enzim** vagy nukleinsav, amely meghatározó szerepet játszik a szervezetben lévő kórokozó elpusztulásában vagy túlélésében. Egy gyógyszer molekula, amelyet gyakran neveznek **ligandumnak**, tipikusan egy kis szerves molekula, amely képes a biológiai célponthoz kapcsolódni (ezt nevezzük **kulcs-zár mechanizmusnak**). A ligandum (legyen az reverzibilis vagy irreverzibilis) kapcsolódása után a biológiai célpont funkciója megváltozik. Ez magában foglalhatja az enzim gátlását aktív helyhez való kötődéssel, a fehérje receptorok blokkolásával vagy aktiválásával; vagy az ioncsatornára gyakorolt hatást.





Szuperszámítógép

AUREL

A Szlovák Tudományos Akadémia
Szolgáltatási és Üzemeltetési Központjának
Számítástechnikai Központja
Pozsony



A szuperszámítógépek fő szerepe a gyógyszer-felfedezésben a ligandumok célhoz való kötődésének mennyiségi leírása. Az alkalmazott számítási módszerek köre igen széles, a kísérleteken és megfigyeléseken alapuló tapasztalások (azaz hiányzik a fizika vagy kémia szigorú elméleti háttér)aránya és a teljesítmény aránya változó.

Gyors, de empirikus szűrési módszereket használnak az ismert kémiai vegyületek hatalmas adatbázisainak vagy az ezekből könnyen szintetizálható molekuláknak az ellenőrzésére. Ezek a módszerek vagy empirikus képleteken, vagy kifinomultabb gépi tanulási módszereken/neurális hálózatokon alapulnak, amelyeket a meglévő adatokra alkalmaznak. Egyébiránt a legkifinomultabb megközelítések szilárd elméleti háttérrel alapulnak: a kvantumkémia és a statisztikai termodinamikán.

Feszegetik a szuperszámítógépek jelenleg lehetséges korlátait, de amint a szuperszámítógépek kellően erősek lesznek, a gyógyszertervezésben és fejlesztésben teljesen új korszak kezdődhet el.

Kíváncsi vagy A TELJES KÉPREGÉNYRE?

superheroes4science.eu
facebook.com/superheroes4science
instagram.com/superheroes4science

Felajánlották
a segítségüket
a gyógymód
megtalálásában.

A szuperszámítógépek
néhány óra alatt
vegyületek milliót
vizsgálhatják meg.

Szuperhősök a tudomány szolgálatában-egy
projekt Visegrádi Alapok támogatásával.

www.visegradfund.org

Visegrad Fund