



MEGHÍVÓ

MTA Székház, Felolvasóterem | 2022. december 15., 14.00 óra

2022. ÉVI ZEMPLÉN GÉZA-DÍJAK ÁTADÁSA

Zemplén Géza-fődíj: *Skodáné Földes Rita*, az MTA doktora

Előadás címe: Nem csupán oldószer - Ionfolyadékok felhasználása katalitikus reakciókban.

Zemplén Géza-díj: *Ábrányi-Balogh Péter* PhD

Előadás címe: Foszfortól a kénen át – multikomponensű és egy-edényes reakciók.

CHRISTMAS LECTURE

Bodor Miklós, az MTA külső tagja

Előadás címe: Retrometabolikus gyógyszertervezés: elmélet, fejlesztés és klinikai sikerek

Az esemény Zoom linkje:

<https://uso2web.zoom.us/j/84406205607?pwd=dzMocGhmSXV2ejRJeGFicU9MOVhwdz09>

Meeting ID: 844 0620 5607 | Passcode: 555340



Skodáné Földes Rita



Ábrányi-Balogh Péter



Bodor Miklós

CHRISTMAS LECTURE – ÖSSZEFOGLALÓ

RETROMETABOLIKUS GYÓGYSZERTERVEZÉS: ELMÉLET, FEJLESZTÉS ÉS KLINIKAI SIKEREK

A retrometabolikus (RM) gyógyszertervezés tudatosan kapcsolja össze a szerkezet-hatás és szerkezet-metabolizmus összefüggéseket. A megfelelő szerkezeti elemeket betervezi az új gyógyszermolekulába, így a kívánt terápiás hatás mellett a molekula lebomlási módja biztosítja a terápiás index ($TI = TD_{50}/ED_{50}$, a toxikus és terápiás dózisok aránya) optimalizálását. Két nagyobb RM molekulacsoport ismert:

- a szervbe irányított kémiai-enzimatis rendszerek (betervezett szakaszos metabolizmus eredményeként a ható molekula feldúsul a célszervben)
- a „lágý” gyógyszerek, amelyek esetében egy enzimatikailag érzékeny, „lágý” szerkezeti rész biztosítja a molekula toxikus hatást elkerülendő, gyors lebontását.

Az első csoporthoz tartozók közül az előadásomban bemutatom a redox irányító rendszereket, melyek az agy-vér gát tulajdonságait felhasználva a központi idegrendszerbe irányítanak és dúsítanak gyógyszereket.

A második csoport több alcsoportja közül az „inaktív metabolit” módszer alapján tervezett két saját tervezésű, nemzetközi forgalomban lévő gyógyszert mutatok be, egy lágý kortikoszteroidot és egy lágý antikolinerg anyagot.

Az RM módszereket széles körben alkalmazzák főleg a lágý gyógyszerek kutatása és ezek fejlesztése terén. A tervezési módszerek logikus elméleti alapja és szerkezete lehetővé tette számítógépes modellezésüket is.