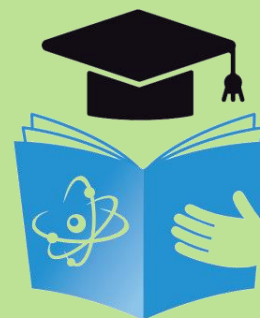


# GYÓGYSZERTERVEZÉS SZÁMÍTÓGÉPES MÓDSZEREKKEL

„AKI KÍVÁNCSI KÉMIKUS”  
MINISZIMPÓZIUM  
2016. JÚLIUS 1.



**MSMS** TUDÁSPONT



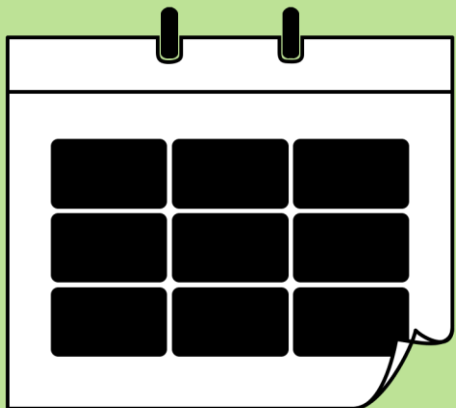
**mta ttk**

**KOPACZ ZSÓFIA**  
**NYARIKI NOEL**

TÉMAVEZETŐK:

BAJUSZ DÁVID  
KISS DÓRA JUDIT

# A GYÓGYSZERTERVEZÉS MENETE



**IDŐIGÉNYES**



**PÉNZIGÉNYES**

CÉLPONT AZONOSÍTÁS

TALÁLATKERESÉS

VEZÉRMOLEKULA  
OPTIMÁLÁS

PREKLINIKA,  
ÁLLATKÍSÉRLETEK

FÁZIS 1: BIZTONSÁG

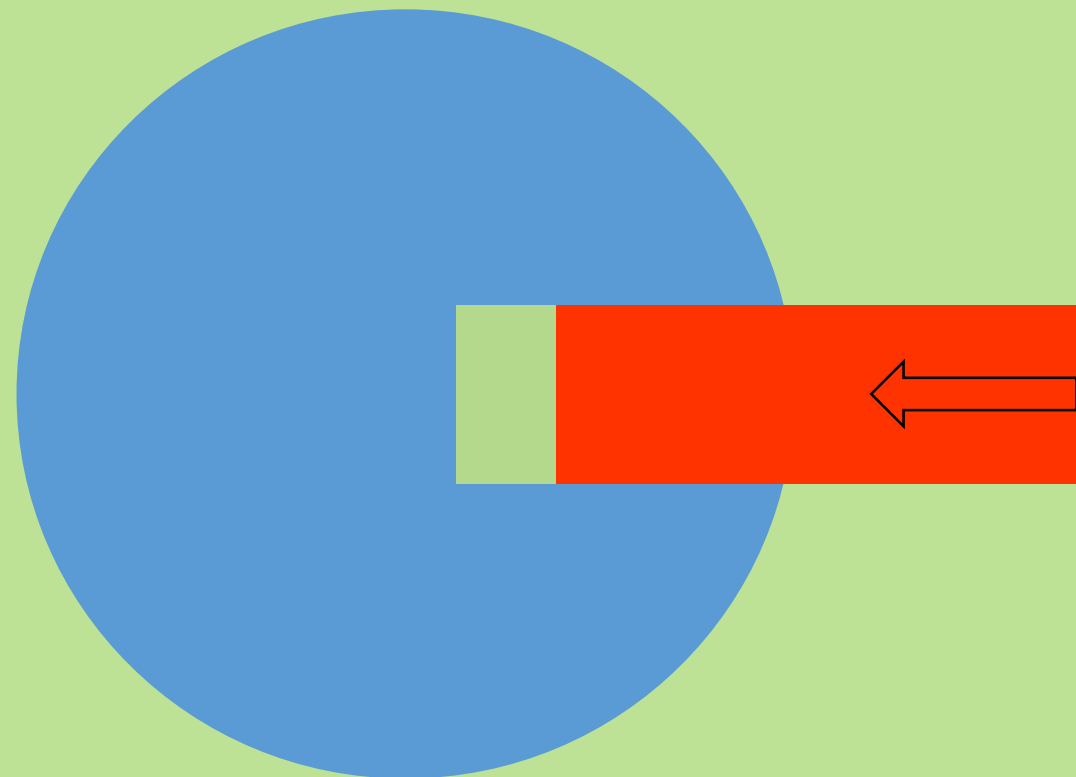
FÁZIS 2:  
HATÁSOSSÁG

FÁZIS 3:  
HATÁSOSSÁG

HATÓSÁGI  
ENGEDÉLYEZÉS



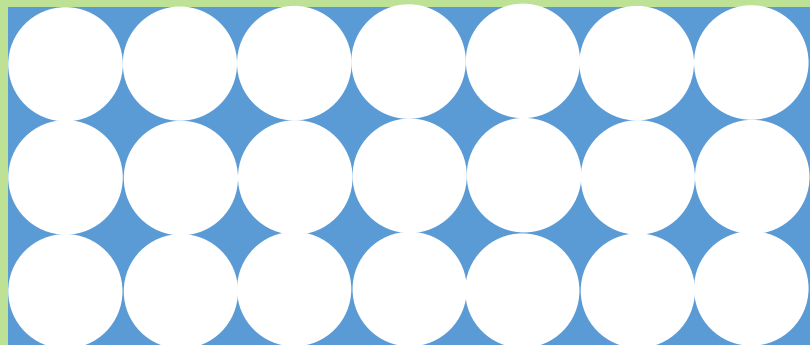
# A KULCS-ZÁR MODELL



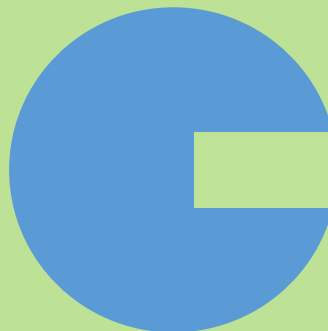
**EMIL FISCHER**

# GYÓGYSZERTERVEZÉS

NAGY ÁTERESZTŐKÉPESSÉGŰ SZŪRÉS

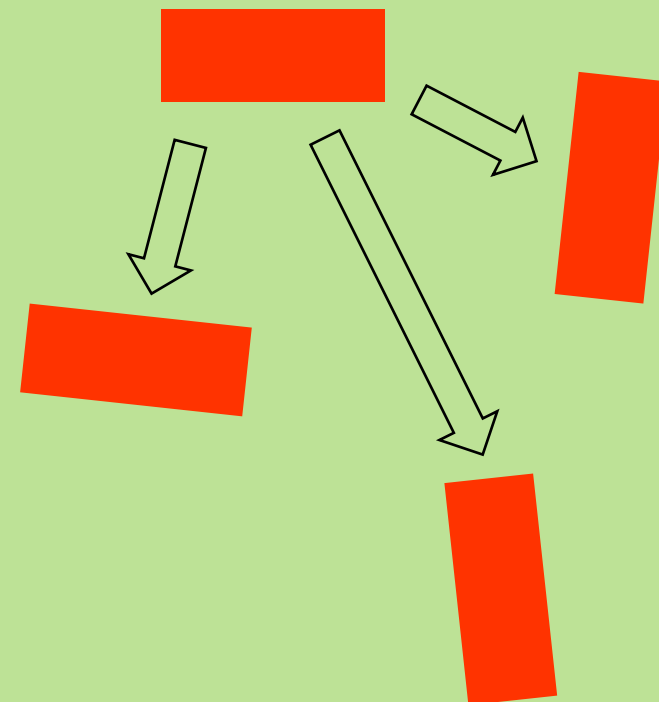


FEHÉRJESZERKEZET ALAPÚ  
LIGANDUMDOKKOLÁS

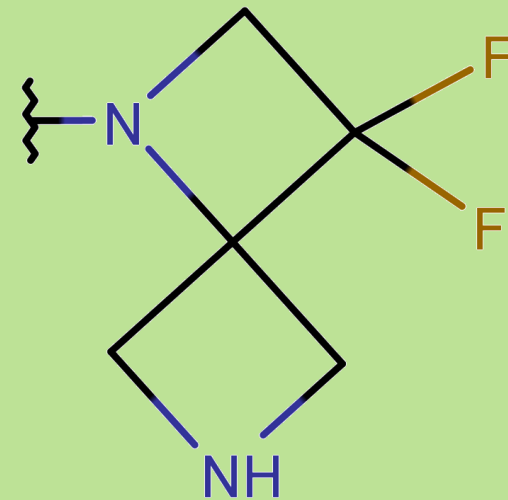


VIRTUÁLIS SZŪRÉS

LIGANDUMALAPÚ

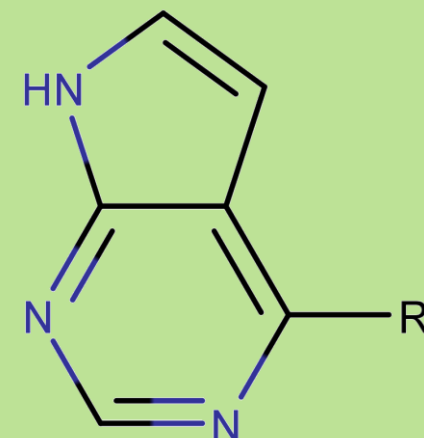
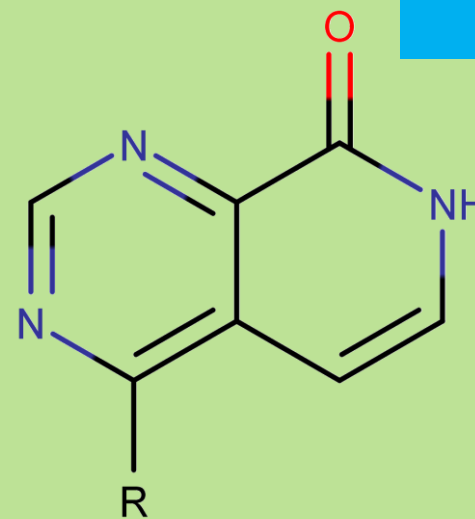


# AZ INHIBITOR KERESÉSE



spirovegyület

alpváz



# AZ INHIBITOR KERESÉSE



# A JANUS-KINÁZ FEHÉRJE



ligandum

**ATP**

# A DOKKOLÁS

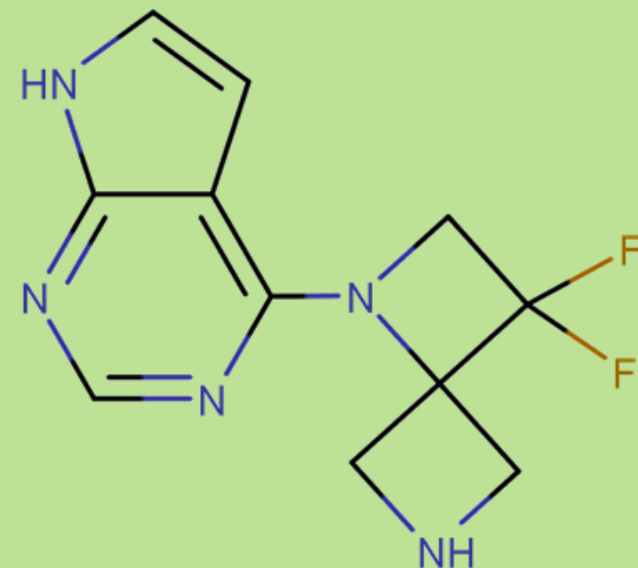
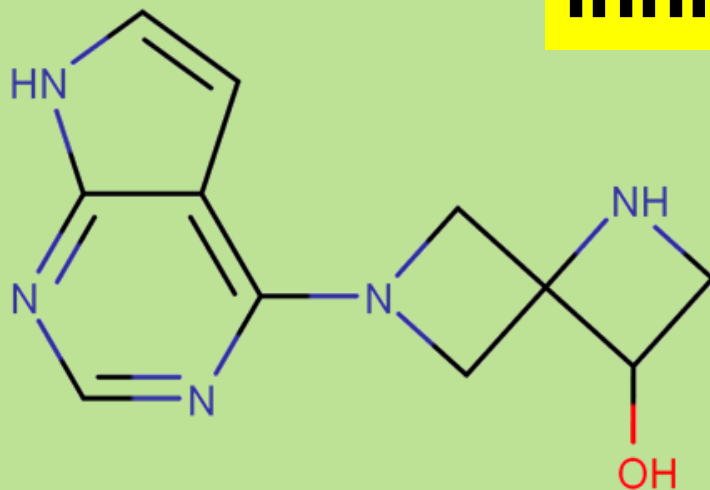
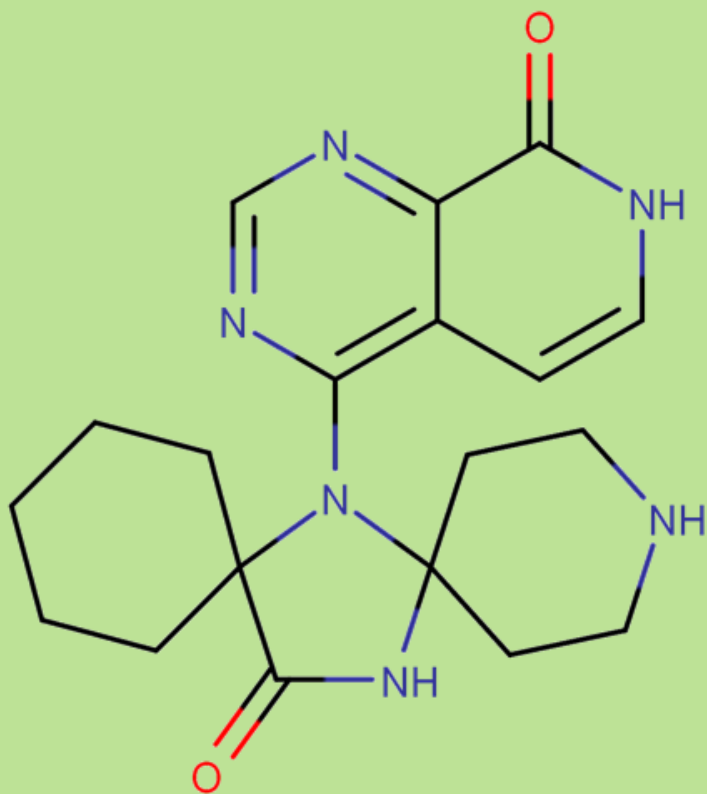
retrospektív validálás

a fehérje szerkezetébe illesztés

a legmegfelelőbb kapcsolódások pontszám alapján

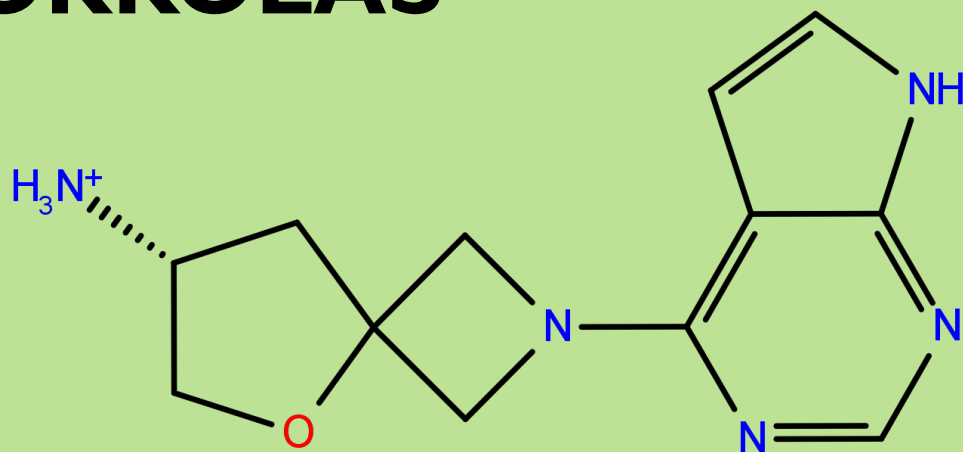
megfelelő helyen másodrendű kötések kialakítása

## JAK2; lehetséges inhibitorok





# A DOKKOLÁS



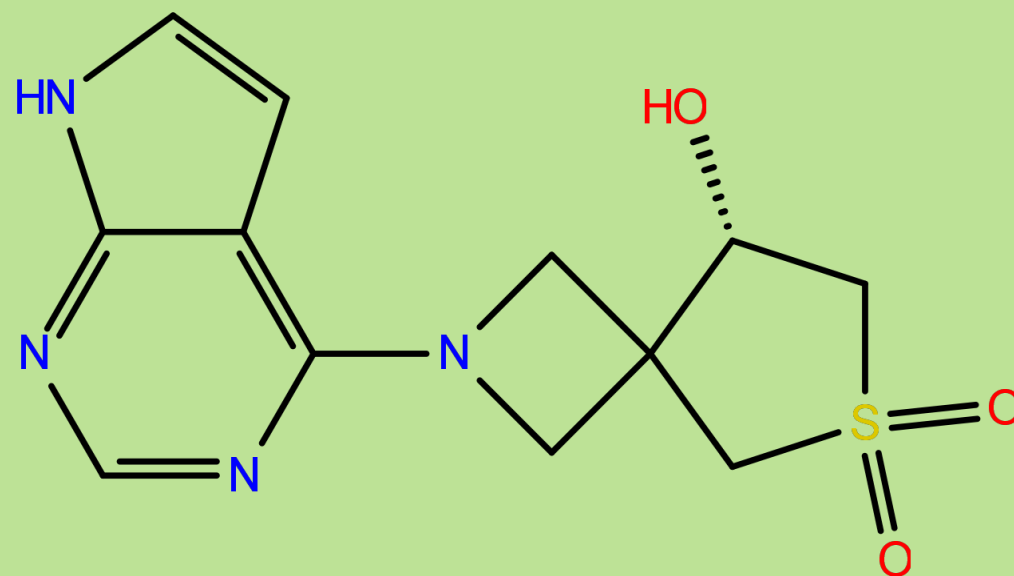
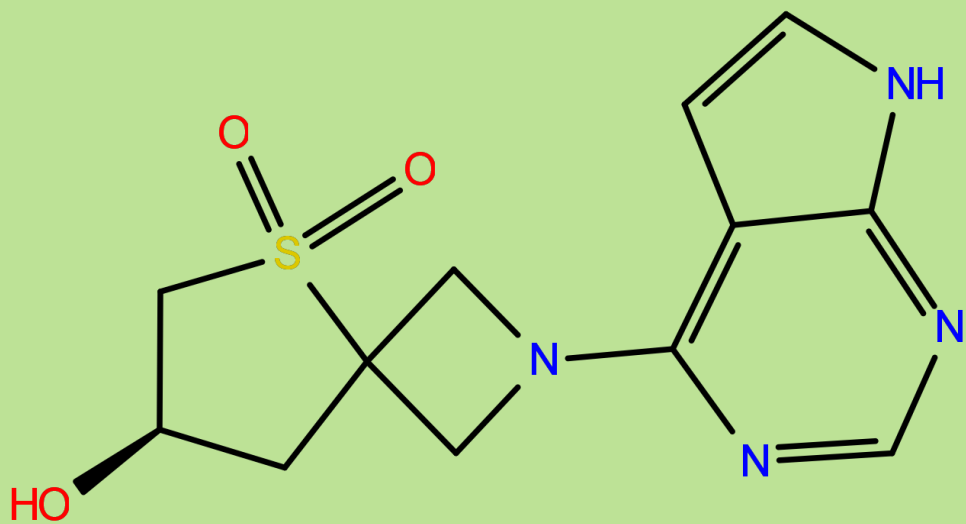
retrospektív validálás

a fehérje szerkezetébe illesztés

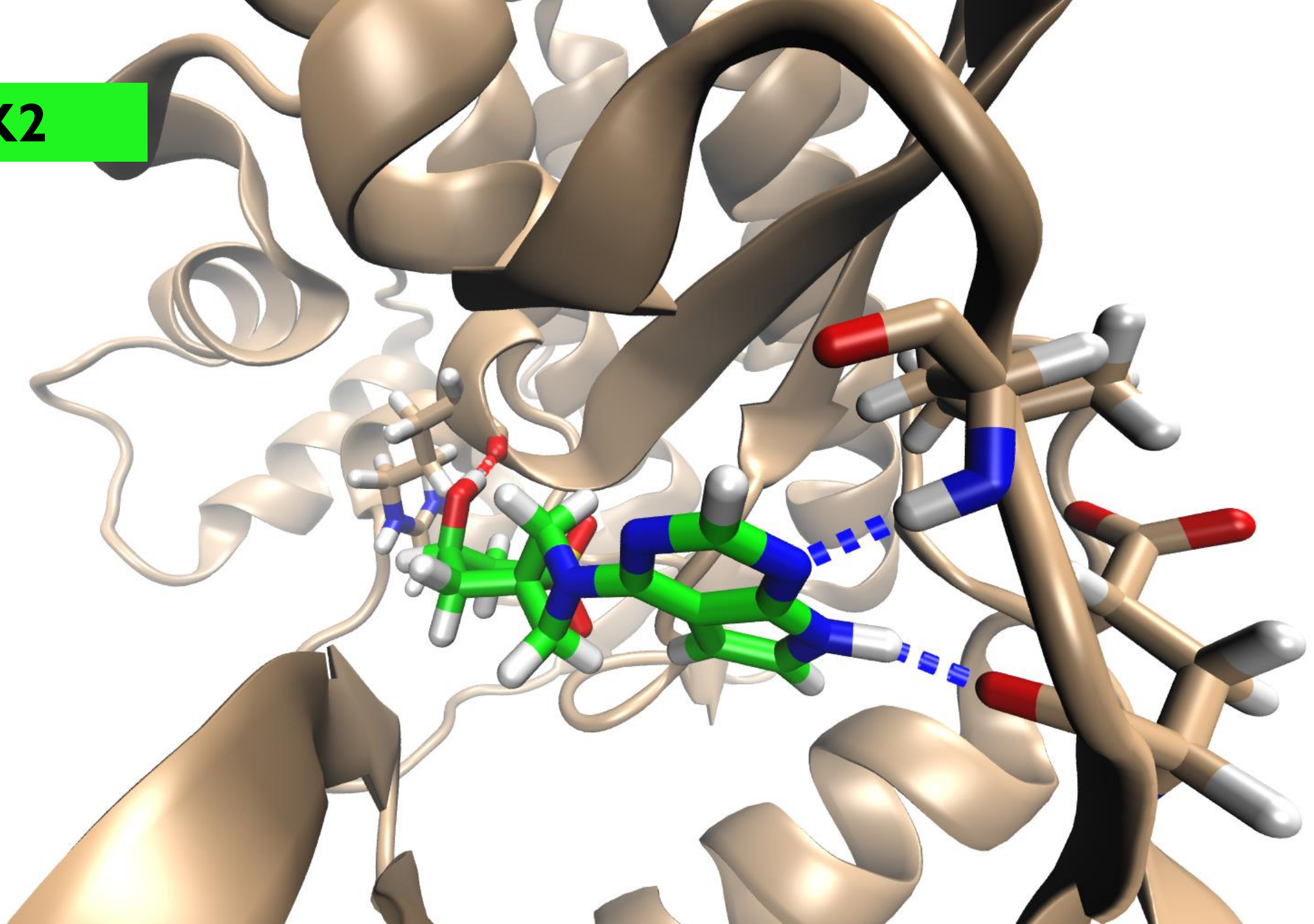
a legmegfelelőbb kapcsolódások pontszám alapján

megfelelő helyen másodrendű kötések kialakítása

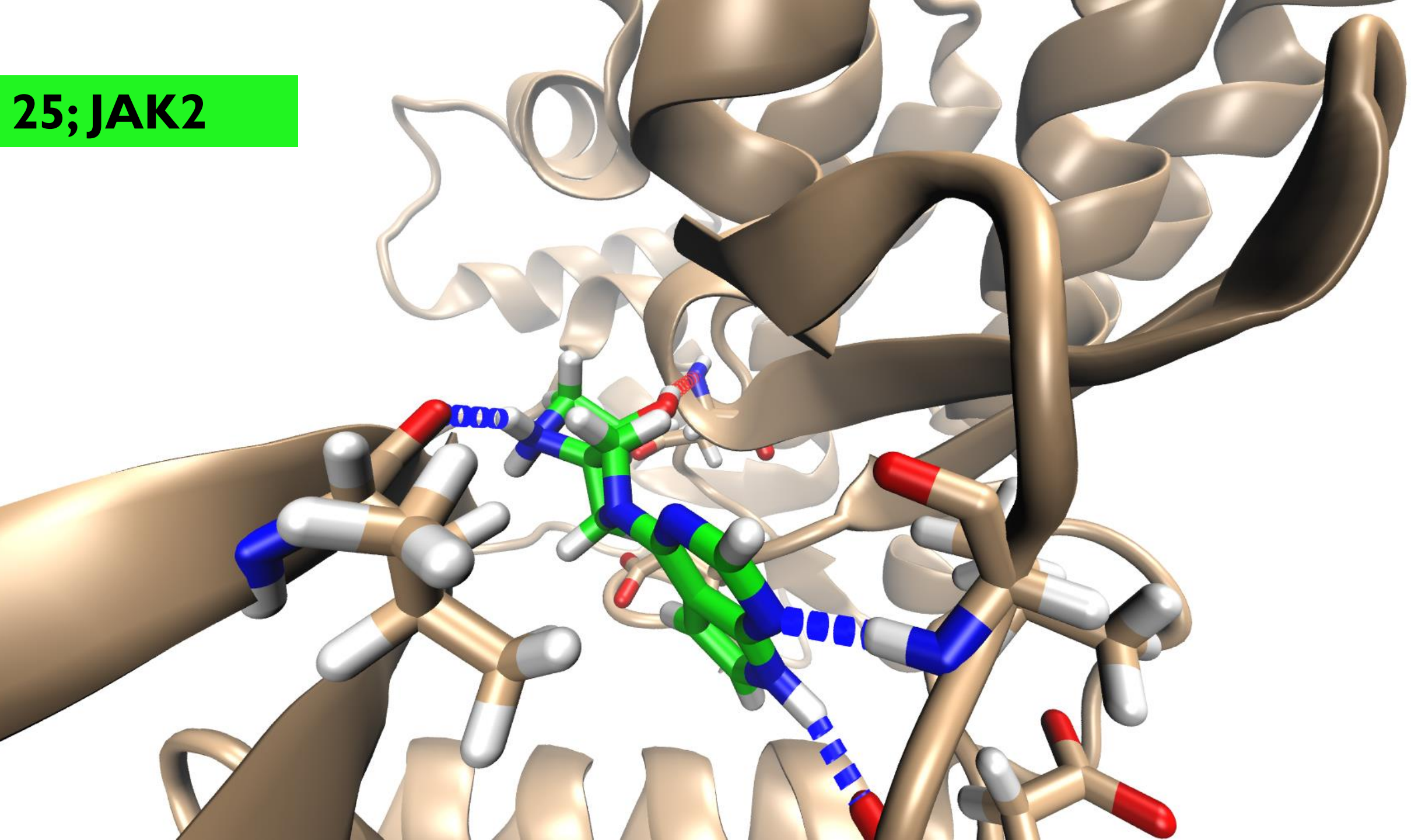
**JAK1; lehetséges  
inhibitorok**



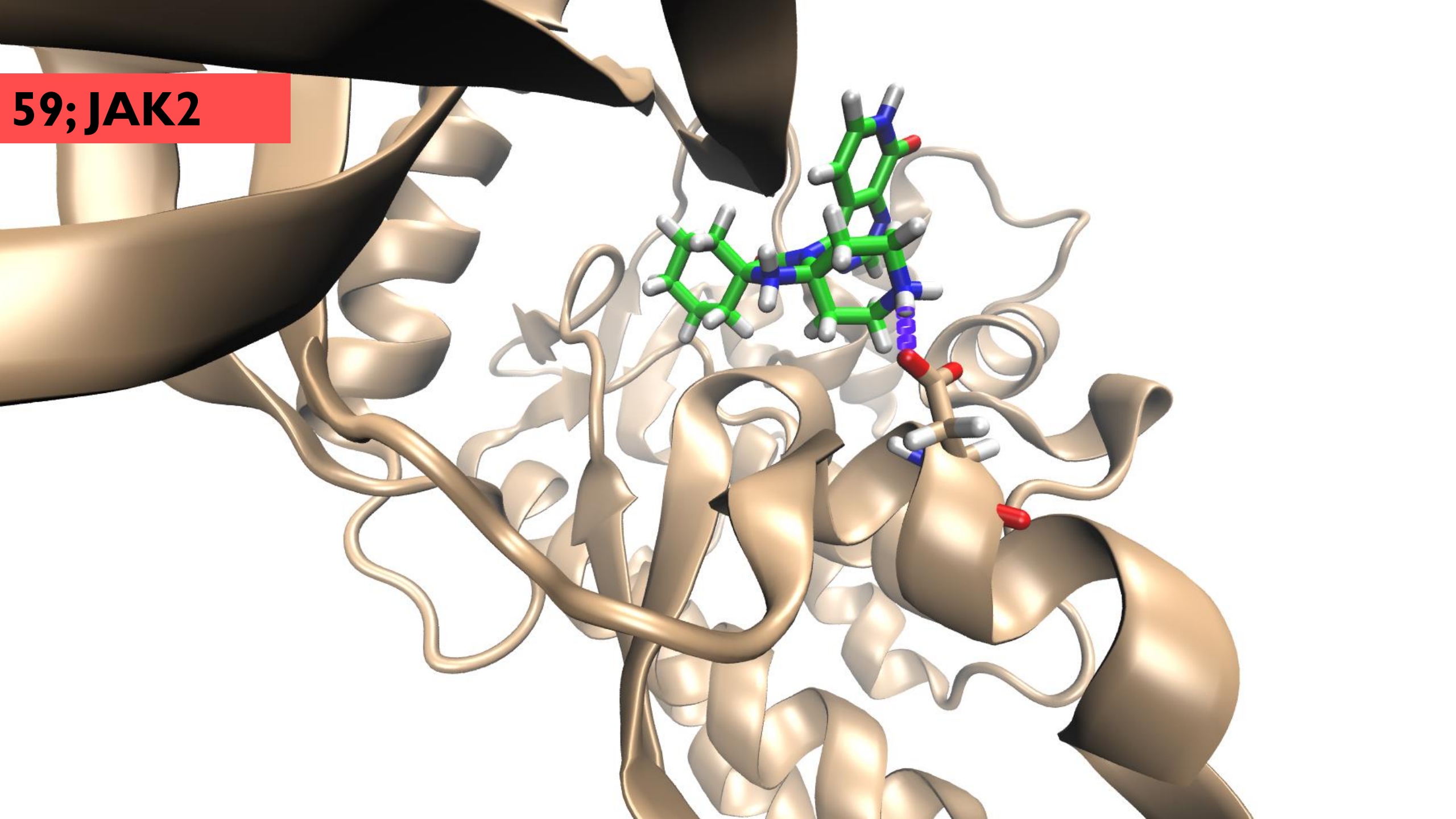
**2I; JAK2**



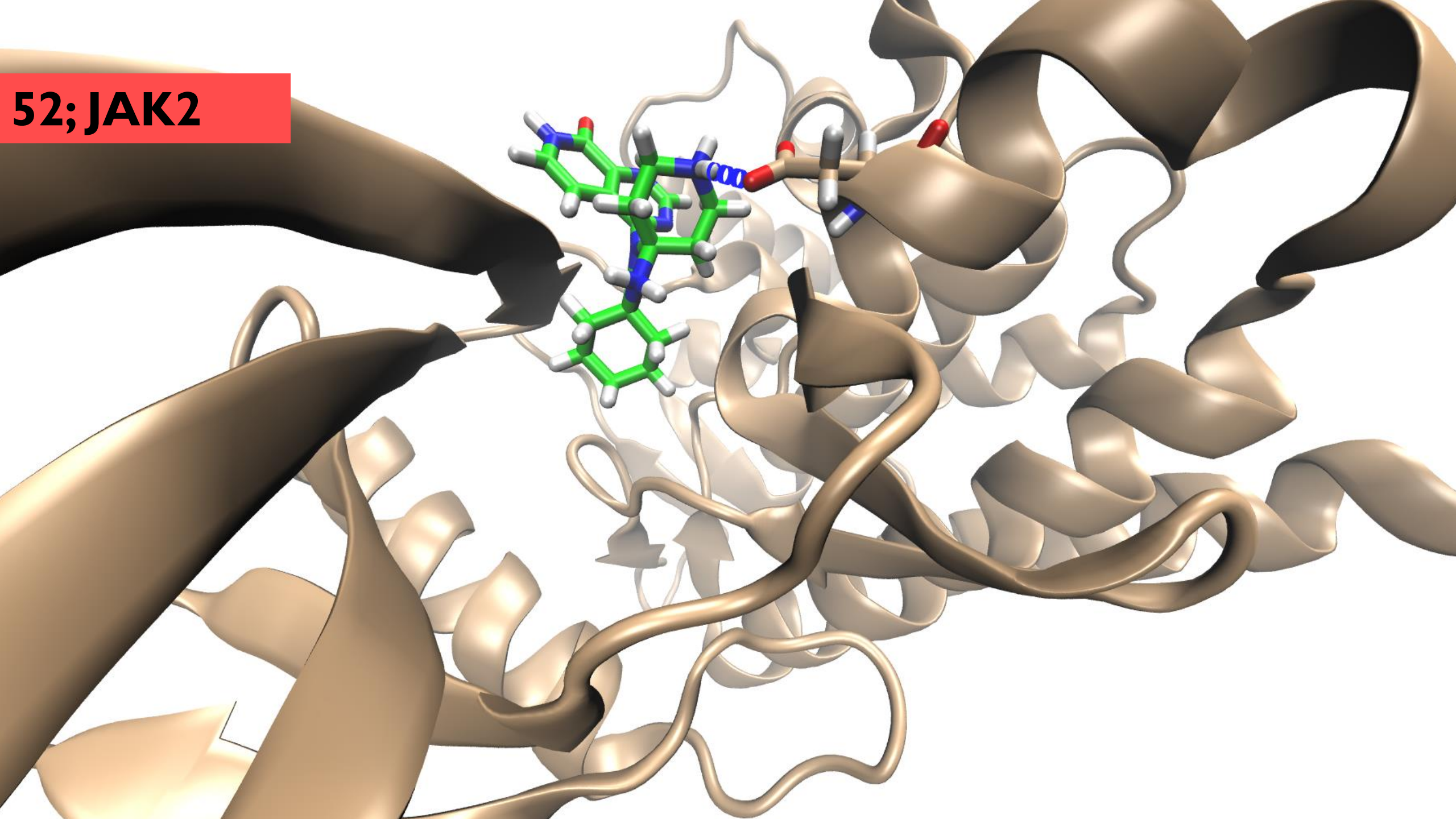
25; JAK2



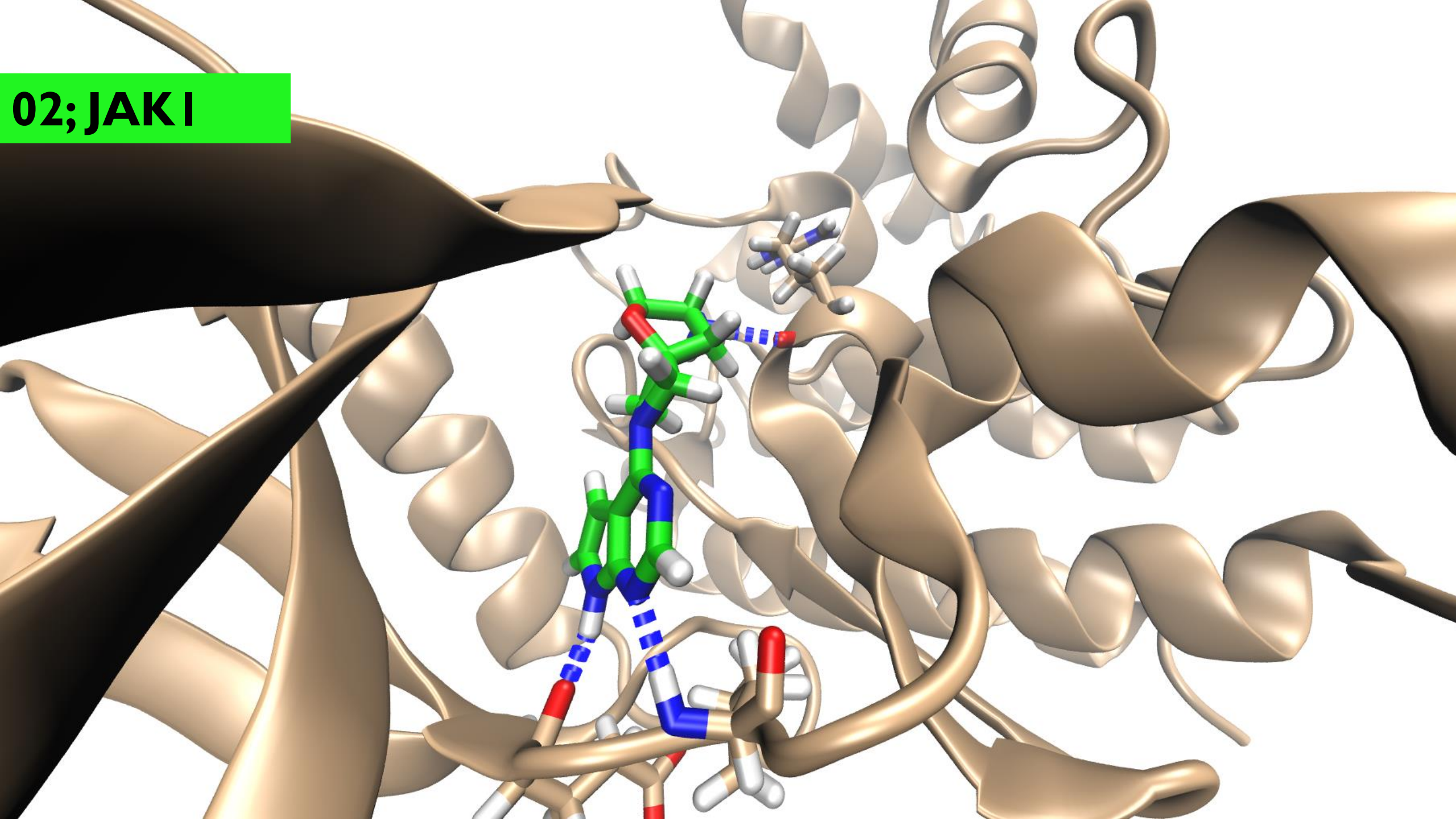
**59; JAK2**



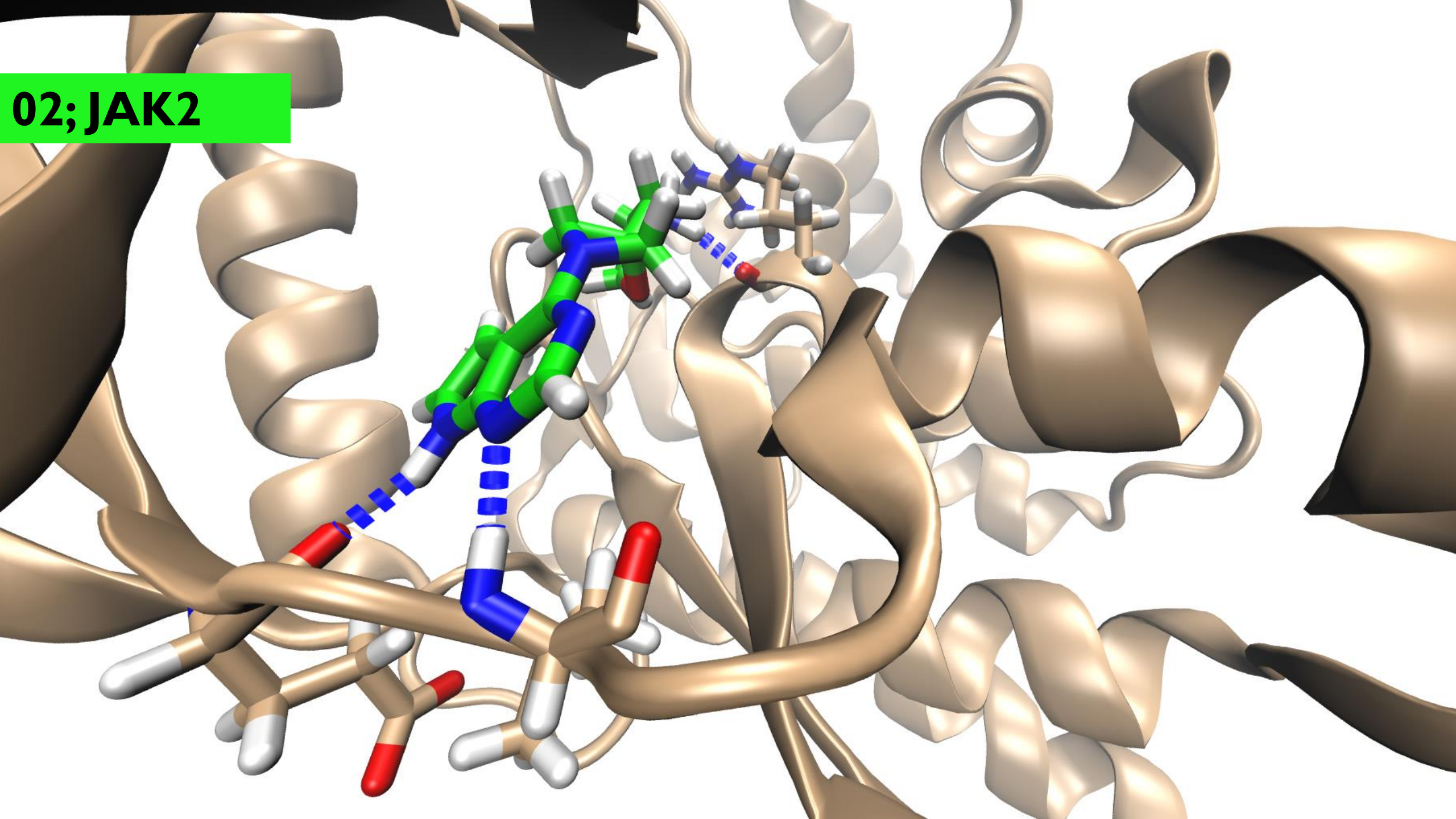
52; JAK2



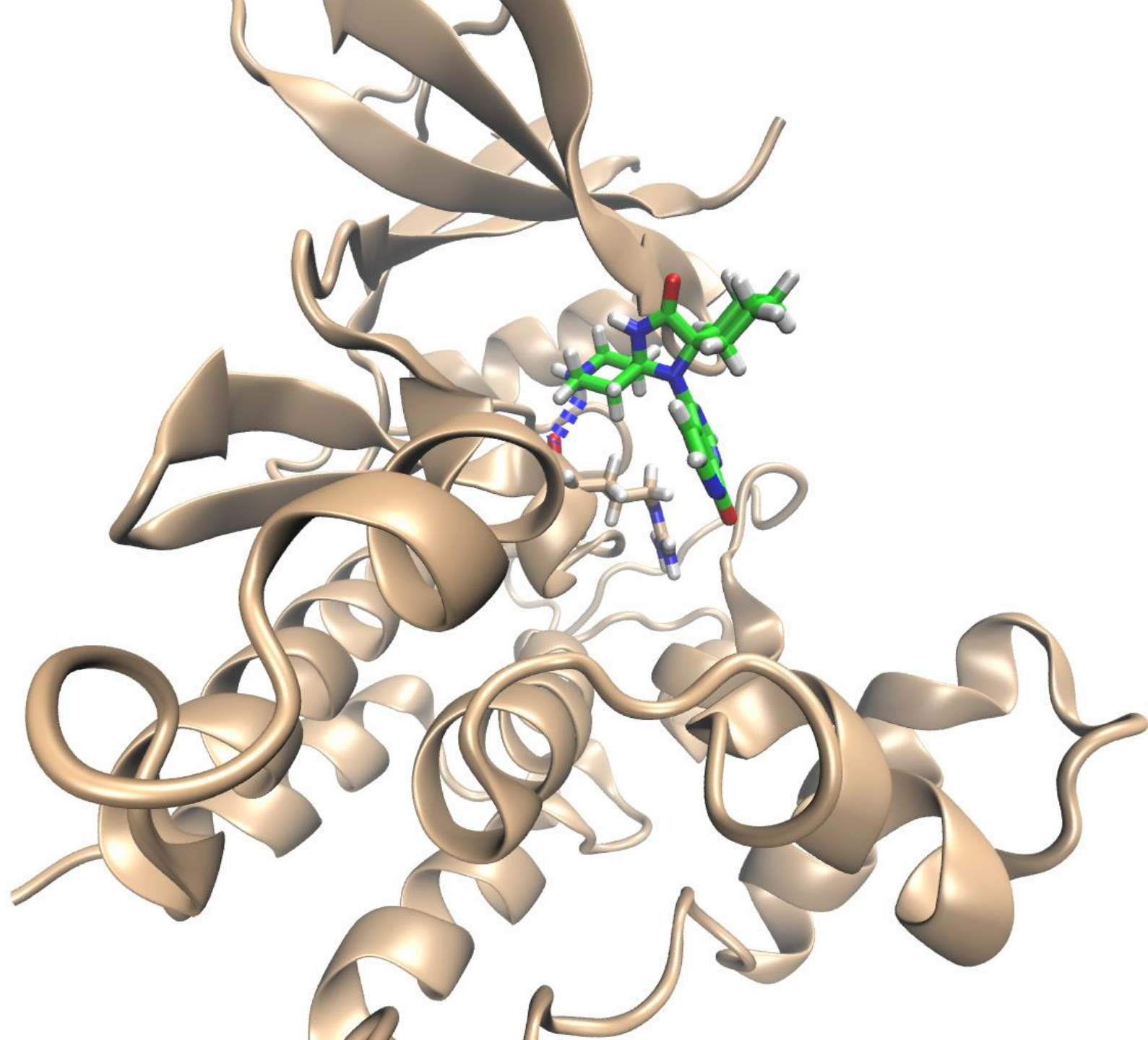
**02; JAK I**



**02; JAK2**

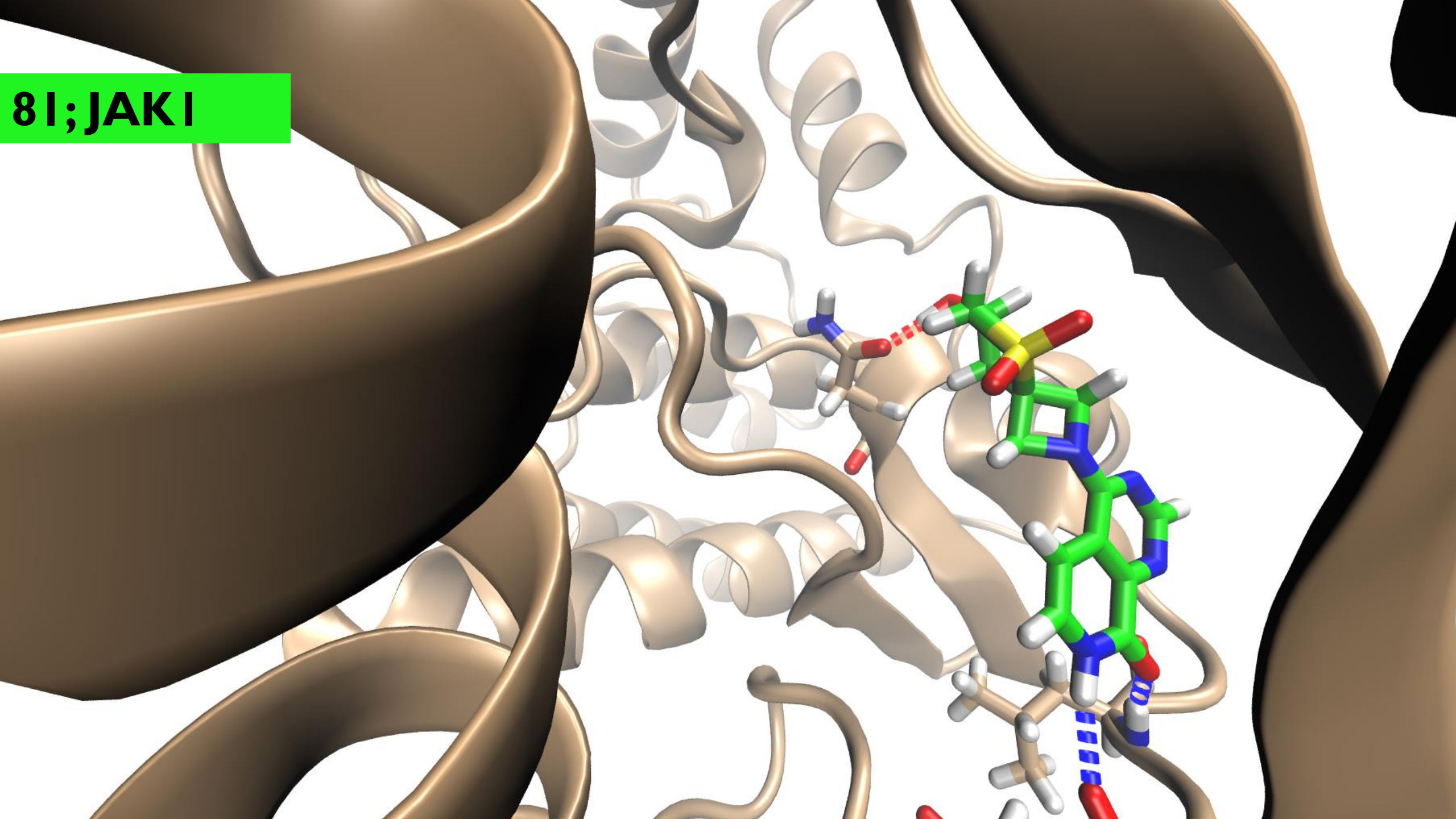


**53; JAK I**





**8I; JAKI**



# KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS



**MSMS** TUDÁSPONT

**FŐSZERVEZŐ**  
**LENDVAYNÉ DR. GYŐRIK GABRIELLA**

**TÉMAVEZETŐK**  
**BAJUSZ DÁVID**  
**KISS DÓRA JUDIT**

**GRAFIKA**  
**BENKŐ EMMA, BERZSENYI DÁNIEL GIMNÁZIUM**



**mta ttk**

# KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS



**MSMS** TUDÁSPONT

**KÉSZÜLT A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA TERMÉSZETTUDOMÁNYI  
KUTATÓKÖZPONTJÁBAN  
2016**



**mta ttk**