Шифр специальности:

02.00.16 Медицинская химия

Формула специальности:

Медицинская химия (англ. medicinal chemistry – лекарственная химия, drug design – дизайн лекарств) – область науки на стыке органической, биоорганической, биологической, математической химии и фармакологии, и в последние годы все более – молекулярной генетики. В соответствии с классификацией ИЮПАК, медицинскую химию в настоящее время определяют как область химической науки, «связанную с выявлением, развитием, идентификацией и исследованием механизма действия биологически активных соединений на молекулярном уровне. Главное внимание при этом направлено на лекарственные препараты, но интересы медицинской химии распространяются также на изучение, установление и синтез метаболитов лекарств и родственных соединений» [Ann.Rep.Med.Chem., 1998].

Предметом медицинской химии является:

– направленное «рациональное» создание химических соединений с заданным типом биологической активности;
– установление молекулярных мишеней и исследовании ехмических аспектов молекулярного механизма действия лекарственных препаратов;
– выявление взаимосвязи между химической структурой и физиологической активностью.

Области исследований:

1. Поиск, структурный дизайн и синтез соединений-лидеров - потенциальных физиологически активных (лекарственных) веществ, на основе: а) знания структурных параметров биомишени или особенностей патогенеза; б) анализа и модификации структур известных активных соединений; в) синтеза и биологического тестирования широкого разнообразия химических соединений.
2. Использование фундаментальных методов математической химии (компьютерного молекулярного моделирования и QSAR) с целью прогнозирования возможности взаимодействия определенных химических соединений с предполагаемой биологической мишенью, а также для выявления взаимосвязи между химической структурой и физиологической активностью.
3. Оптимизация структуры соединения-лидера с целью повышения его активности и селективности и использование для этих целей таких приемов, как изменение конформационной подвижности исходной молекулы, биоизостерическая замена, создание аналогов по принципу трехмерного фармакофорного подобия и др.

4. Оптимизация структур химических веществ с целью улучшения их комплексных физико-химических, фармакокинетических и фармакодинамических характеристик. Использование для этих целей таких приемов, как изменение баланса липофильных и гидрофильных групп в структуре соединения-лидера, создание пептидомиметиков, создание пролекарств, введение/устранение метаболизируемых групп, создание модифицированных систем доставки и ДР-
5. Рациональное создание физиологически активных соединений, действующих на две и более молекулярные мишени (в т. ч. двойных, двояко-действующих, гибридных, мультитаргетных лекарств).
6. Биологическое и физиологическое (in vitro и in vivo) тестирование сконструированных и синтезированных соединений на предмет изучения особенностей их взаимодействия с молекулярными мишенями организма.
7. Хемогеномика, или исследование взаимосвязи между структурами геномов живых организмов, связанных с инициацией и развитием патогенных состояний, соответствующих протеомов (биомишени, регуляторные каскады, системы метаболизма), а также низкомолекулярных модуляторов функций последних.
8. Физико-химические исследования лиганд-рецепторных взаимодействий с целью выявления фармакологической пригодности соединений. Использование методов докинга, рентгеноструктурного анализа, ЯМР спектроскопии, микрокалориметрии, поверхностного плазмонного резонанса для установления структурно-функциональных взаимоотношений потенциальных лекарственных средств.

Отрасль наук:

химические науки
технические науки