

Proces tworzenia nowych leków: od pomysłu do apteki

dr hab. Rafał Kurczab, prof. AT

16.10.2026

Wykład

9:45-11:15

Sala b028

Lek to substancja chemiczna, która po spożyciu lub innym sposobie podania powoduje powstawanie odpowiedzi fizjologicznej organizmu na dane objawy chorobowe. Znalezienie odpowiedniej cząsteczki chemicznej, która stanie się lekiem, to proces bardzo złożony i drogi. Na wykładzie omówione zostaną główne metody komputerowo-wspomagane projektowania leków używane obecnie w przemyśle i nauce. Uczestnicy wykładu zostaną także zapoznani z etapami, jakie obecnie musi przejść każdy nowy lek od momentu opuszczenia przez niego probówki chemika, przez formulację, do ostatecznej formy lekarstwa.

Demonstracje:

W trakcie wykładu zademonstrowane zostanie dokowanie molekularne - symulacje komputerowe, które pozwalają na sprawdzenie stopnia dopasowania cząsteczki chemicznej do miejsca aktywnego receptora. Uczestnicy wykładu zapoznani zostaną z etapami dokowania oraz analizą wyników zwracanych przez algorytm. W trakcie symulacji pokazany zostanie przykład rozpoznawania aktywnych i nieaktywnych cząsteczek chemicznych za pomocą dokowania molekularnego.