



Свитанко  
Игорь Валентинович



Новиков  
Федор Николаевич



Абдюшева  
Яна Раульевна



Эрдели  
Кирилл Эндревич



Мурлатова  
Елизавета Юрьевна

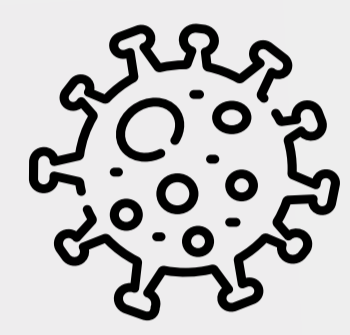
Основная задача научной группы - увеличение степени предсказуемости синтеза, и достижение необходимого результата - конечного продукта - быстрее, меньшими усилиями и меньшими затратами - принципиальная инновация и до сих пор не решенная глобальная экономическая и методологическая задача синтетической химии.

В состав группы входят студенты 2 курса факультета химии НИУ ВШЭ

## ПУТЬ ЛЕКАРСТВА

Для того, чтобы препарат начали разрабатывать ученые или фармацевтическая фирма, должно быть сочетание нескольких факторов:

социальная значимость заболевания



известные молекулярные механизмы развития заболевания

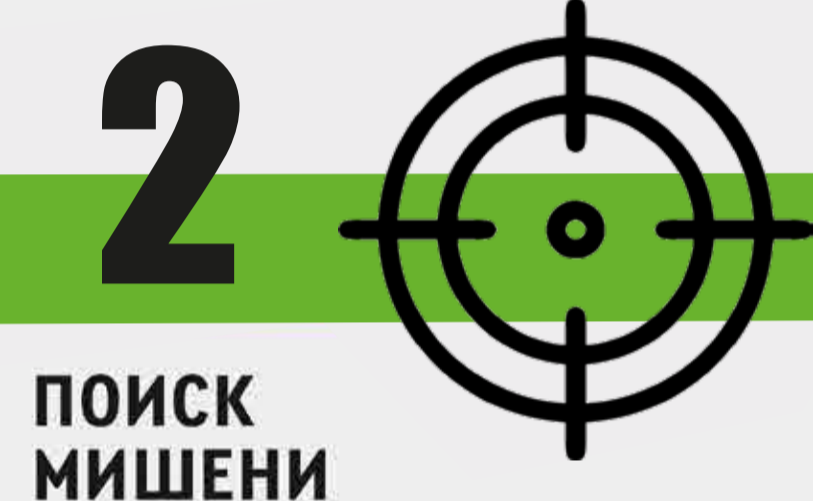


финансовые возможности



- 1 год  
50 млн \$

- 2 года  
- 100 млн \$



ПОИСК МИШЕНИ



МОДЕЛИРОВАНИЕ



биологически активные образцы проходят в следующий этап

- 2 года  
- 100 млн \$

- 4 года  
- 250 млн \$



ДОКЛИНИЧЕСКОЕ ТЕСТИРОВАНИЕ

ОЦЕНИВАЮТСЯ



Тестирование "в пробирках" (in vitro) - эксперименты на отдельных клетках или органах

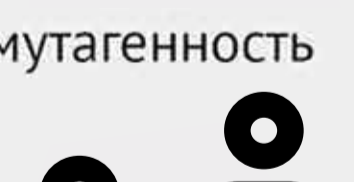
Только опыты на животных могут ответить на вопрос, появляются ли желательные эффекты



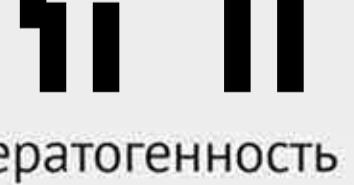
ТОКСИЧНОСТЬ



МУТАГЕННОСТЬ



ТЕРАТОГЕННОСТЬ



онко-, канцерогенность



КЛИНИЧЕСКОЕ ТЕСТИРОВАНИЕ

Теперь осталось протестировать все на людях

- 8 лет  
- 350 млн \$



Фаза I  
сперва на здоровых добровольцах

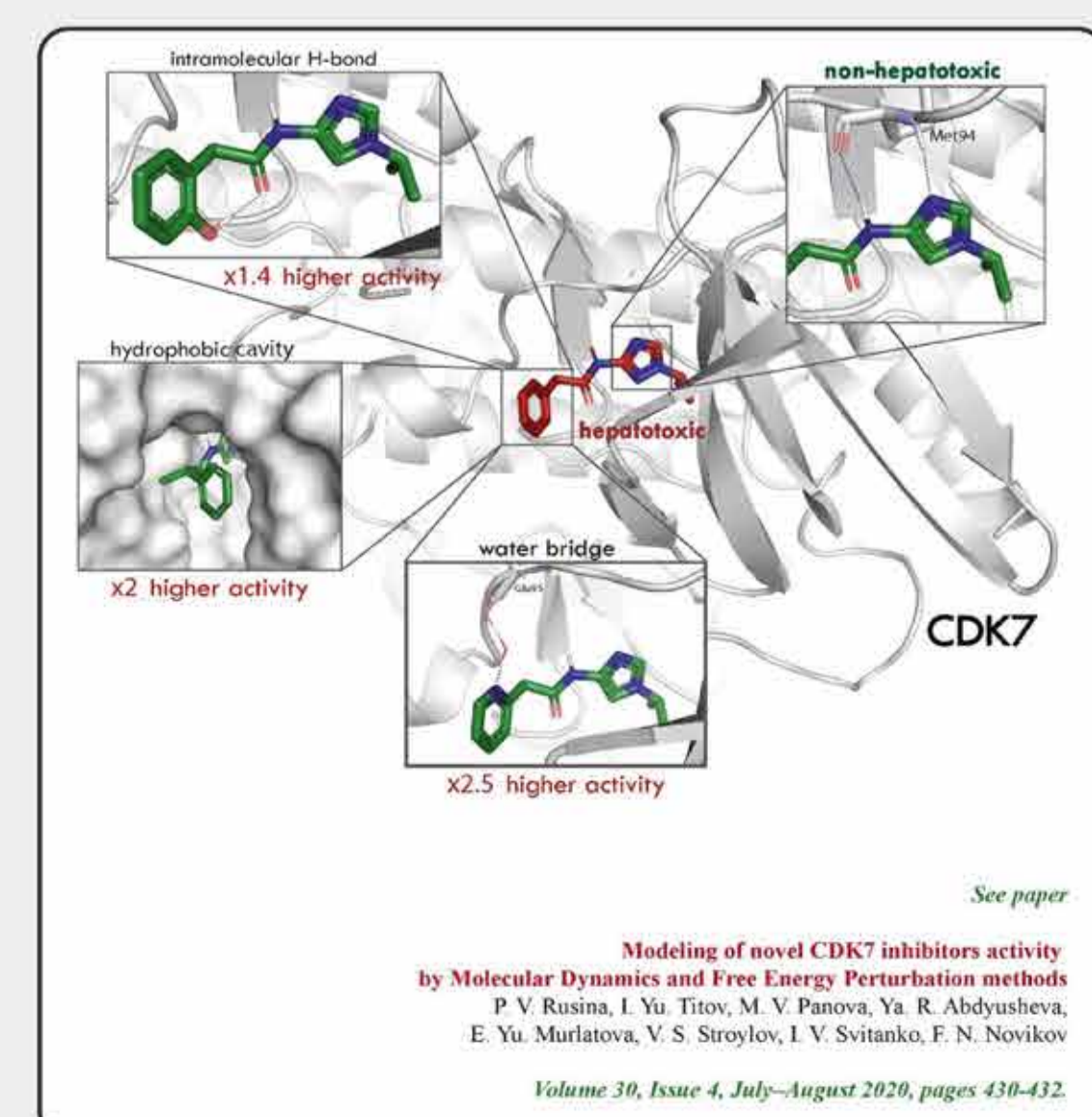


Фаза II  
потом на пациентах

Фаза III



затем на больших группах пациентов



Были смоделированы, синтезированы и охарактеризованы потенциальные ингибиторы циклин-зависимой киназы 7 (CDK7), применимые в терапии рака. Оценка связывания, прогнозируемая методами MD/FEP, показала высокое соответствие полученным экспериментальным данным. Ингибиторы, полученные этими методами, не обладают потенциальной гепатотоксичностью.