

Chemia medyczna w ciągu ostatnich lat uległa znaczącym zmianom w związku z wprowadzeniem na szeroką skalę technik chemii kombinatorycznej oraz projektowaniem leków w oparciu o ich strukturę. Dzięki tym narzędziom, łatwiejsza jest identyfikacja struktur wiodących oraz synteza ich analogów tak, aby zmaksymalizować szansę na znalezienie związków o pożądanej aktywności biologicznej.

Jednym z kluczowych aspektów, podczas oceny potencjalnych kandydatów na leki, jest określenie ich właściwości fizykochemicznych takich jak lipofilowość, rozpuszczalność w środowisku wodnym oraz powinowactwo do fosfolipidów i białek osocza. Należy pamiętać, że każda substancja lecznicza musi znaleźć się w miejscu docelowym w odpowiednim stężeniu oraz pozostać w formie bioaktywnej odpowiednio długo, tak aby wystąpił oczekiwany efekt farmakologiczny. Obecne badania wskazują, że nieodpowiednie właściwości farmakokinetyczne, do których należą: absorpcja, dystrybucja, metabolizm oraz eliminacja (ADME), są jedną z głównych przyczyn niepowodzeń w pracach nad rozwojem nowych leków. Szacuje się, że w przypadku 6 na 7 badanych kandydatów to właśnie nieodpowiednie właściwości farmakokinetyczne były powodem wstrzymania dalszych badań klinicznych.

Obecnie dostępne są liczne modele matematyczne i programy umożliwiające ocenę lipofilowości i powinowactwa do białek osocza. Brak jest natomiast narzędzi, które umożliwiają przewidywanie powinowactwa do fosfolipidów. Realizacja projektu ma na celu wypełnienie tej luki i opracowanie podejścia, które będzie umożliwiała estymację powinowactwa do fosfolipidów w oparciu o strukturę molekuly. Należy podkreślić, że powinowactwo do fosfolipidów jest bardziej biopodobną miarę lipofilowości substancji leczniczych, niż obecnie stosowany współczynnik  $\log P$  odnoszący się do podziału substancji między wodę a  $n$ -oktanol.