

Vychádzal pod názvami

SLOVENSKÝ LEKÁRNIK (1931 – 1950),
FARMÁCIA (1951 – 1960)

Vedúci redaktor: doc. PharmDr. J. SÝKORA, CSc.
Zástupca ved. red.: PharmDr. L. ČERNUŠKOVÁ, CSc.
Odborní redaktori: prof. PharmDr. J. KYSELOVIČ, CSc.,
RNDr. J. SLANÝ, CSc.

Redakčná rada: RNDr. A. Bartunek
doc. RNDr. L. Bezáková, CSc.
prof. RNDr. D. Grančai, CSc.
prof. MUDr. V. Krčméry, DrSc.
PharmDr. Š. Krchňák
prof. MUDr. M. Kriška, DrSc.
PharmDr. J. Mazag
prof. RNDr. D. Mlynarčík, DrSc.
doc. RNDr. E. Sedlárová, CSc.
† prof. MUDr. P. Švec, DrSc.

OBSAH

Prehľady a experimentálne práce

Milan REMKO, Andrej BOHÁČ: Základná terminológia vo farmaceutickej a medicínskej chémii	99
Margaréta ŠUBOVÁ, Juraj SÝKORA: DIAPREL MR 60 MG – matrica s riadeným uvoľňovaním glikazidu	113
Milan KRIŠKA, Ján GAJDOŠÍK, Andrej DUKÁT, Marián BERNADIČ: Prevencia zlyhania farmakoterapie v bežnej klinickej praxi	117
Alžbeta LENGYELOVÁ, Desana MATUŠOVÁ, Kristína LENGYELOVÁ: Porovnanie individuálnej prípravy liekov na dermálnu aplikáciu v Španielsku a na Slovensku	121
Monika MAČKINOVÁ: Faktory ovplyvňujúce zvládnutie krízy v živote človeka	125

Personálie

Daniel GRANČAI: K životnému jubileu prof. Viliama Foltána	135
---	-----

CONTENT

Reviews and articles

Milan REMKO, Andrej BOHÁČ: Basic terminology in pharmaceutical and medicinal chemistry	99
Margaréta ŠUBOVÁ, Juraj SÝKORA: DIAPREL MR 60 MG – matrix with modified release of gliklazide	113
Milan KRIŠKA, Ján GAJDOŠÍK, Andrej DUKÁT, Marián BERNADIČ: Preventing of the Pharmacotherapy Failure in Common Clinical Practice	117
Alžbeta LENGYELOVÁ, Desana MATUŠOVÁ, Kristína LENGYELOVÁ: Comparison of individually prepared drugs for dermal application in Spain and in Slovakia	121
Monika MAČKINOVÁ: Factors affecting management of the life crisis in human life	125

FARMACEUTICKÝ OBZOR – časopis pre farmaceutickú vedu a prax

Vydáva Slovenská zdravotnícka univerzita v Bratislave v Zdravotníckom vydavateľstve Herba, spol. s r. o.,
Limbová 12, 833 03 Bratislava 37. IČO 00 165 361
Index. číslo 49 171. EV 151/08

Adresa redakcie:

Slovenská zdravotnícka univerzita, Limbová 12, 833 03 Bratislava 37
lucia.cernuskova@szu.sk

Vychádza mesačne. Cena jedného čísla 1,90 €

Objednávky na predplatné: predplatne.obzor@szu.sk, telefón: 02/59 370 657

Imprimovanie rukopisov: 19. 12. 2016. Číslo vyšlo v decembri 2016. J. č. 388/95–P

Vydavateľ neručí za kvalitu výrobkov a služieb ponúkaných v reklamách jednotlivých firiem.

Tlač Sineal, Bratislava

Základná terminológia vo farmaceutickej a medicínskej chémii

Basic terminology in pharmaceutical and medicinal chemistry

Milan REMKO¹, Andrej BOHÁČ²

¹Univerzita Komenského, Farmaceutická fakulta, Katedra farmaceutickej chémie

²Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie a Biomagi, s.r.o.

¹ Comenius University in Bratislava, Faculty of Pharmacy, Department of Pharmaceutical Chemistry, Slovakia

² Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Organic Chemistry and Biomagi, Ltd. Slovakia

Súhrn

Cieľom tohto príspevku je poskytnúť základný dokument odbornej terminológie a definícií používaných vo farmaceutickej a medicínskej chémii. Takýto dokument v slovenskej odbornej literatúre dosiaľ chýba. Potreba základnej terminológie sa stala nevyhnutnou vzhľadom na rýchly vývoj v oblasti farmaceutickej a medicínskej chémie a aj vzhľadom na etablovanie sa tohto predmetu na viacerých farmaceutických a chemických študijných odboroch na slovenských vysokých školách. Navyše rôzne aspekty výskumu a vývoja liečiv sú v súčasnosti predmetom skúmania na viacerých akademických aj aplikačných vedeckých pracoviskách u nás. Slovenská terminológia vychádza z medzinárodne prijatej terminológie sekcie medicínskej chémie IUPAC. Glosár vypracovala pracovná skupina odbornej skupiny „Medicínska chémia“ Slovenskej chemickej spoločnosti. Pri jeho príprave boli využité dlhoročné skúsenosti autorov z tejto oblasti a obsahuje aj definície publikované v odborných časopisoch alebo knižných publikáciách, ktoré nemusia byť vždy bežne dostupné. Základná terminológia zahŕňa stručné, ale dostatočne vysvetľujúce definície 370 používaných termínov vo farmaceutickej a medicínskej chémii, ktoré by mali byť zaujímavé aj pre širšiu odbornú verejnosť.

Kľúčové slová: glosár – farmaceutická chémia – medicínska chémia – terminológia

Summary

The objective of this contribution is to provide in a single document a basic terminology and definitions of terms used in pharmaceutical and medicinal chemistry. Up to now, the specialised glossary was missing in the Slovak scientific literature. The need of basic terminology become necessary with regard to the rapid changes occurring in pharmaceutical and medicinal chemistry and, also from the point of establishment of this subject in several pharmaceutical and chemical fields of study at universities in Slovakia. In addition, various aspects of drug design and development are a subject of research also in different academic and industrial Slovak institutions. Slovak terminology is based on the international standards prepared by a Working Party of the IUPAC Section on Medicinal Chemistry. The glossary was worked out by a working group established in the Medicinal Chemistry Section of the Slovak Chemical Society. This specialised dictionary of terms is based on long-standing professional experiences of the present authors, together with the well-accepted definitions taken from the scientific papers and books that may not be readily accessible. Sufficiently explanatory definitions have been formulated for about 370 terms used in pharmaceutical and medicinal chemistry which could be interesting also for a wider scientific community.

Keywords: glossary – pharmaceutical chemistry – medicinal chemistry – terminology

Úvod

Prudký rozvoj chemických, biologických a farmaceutických vied v 20. storočí sa odrazil aj v oblasti výskumu a vývoja nových chemických liečiv. Prvými farmaceutickými chemikmi boli zrejme lekárnici, ktorí sa vo svojich lekárňach zaoberali prípravou a dispensáciou herbálnych liečivých látok v snahe nájsť vhodnej terapie pre zdravotné problémy zákazníkov. Na tomto základe vznikla aj farmaceutická chémia ako jedna z profilových disciplín štúdia farmácie. Súčasne

s vývojom v oblasti biológie začína do oblasti medicíny prenikať aj chémia. Syntetické farbivá a hlavne ich terapeutické „vedľajšie činky“ umožnili Nemecku a Švajčiarsku dostať sa na čelo vývoja v oblasti organickej chémie a syntézy liečiv. Príkladom je vývoj fenaacetínu (liečivo uvoľňujúce bolesť) roku 1887 Bayerom. O desať rokov neskôr Felix Hoffman (spoločnosť Bayer) syntetizoval kyselinu acetylsalicylovú (Aspirin), ktorá je nepretržite na trhu s liekmi už od roku 1899. Paralelne s vývojom a výrobou prvých chemických liečiv sa

vyvinuli a do praxe zaviedli aj zodpovedajúce spôsoby balenia jednotlivých dávok liekov. Už roku 1883 sa priemyselne zaviedla výroba prvého komerčného liečiv vyvinuli a do praxe zaviedli aj zodpovedajúce spôsoby pacientom. Dizajn, výskum, vývoj a príprava chemických liečiv sa stáva domovom chemických laboratórií a je základom nového odboru nazvaného medicínska chémia. Roku 1974 špeciálna komisia IUPAC definovala medicínsku chémiu nasledovne: „*Medicínska chémia sa zaoberá projektovaním a prípravou zlúčenín, ktoré sa dajú použiť v medicíne na prevenciu, liečenie alebo vyliečenie chorôb u ľudí alebo zvierat. Medicínska chémia sa zaoberá aj objavovaním, vývojom, identifikáciou a interpretáciou spôsobu účinku biologicky aktívnych zlúčenín na molekulovej úrovni.*“ Éra skutočnej medicínskej a farmaceutickej chémie sa datuje k začiatku 30. rokov 20. storočia prípravou a terapeutickým využitím antibakteriálne účinných sulfónamidov a v súčasnosti patrí medzi najinovatívnejšie chemické odbory.

Slovník (glosár) termínov používaných vo farmaceutike vyvinuli a do praxe zaviedli aj zodpovedajúce spôsoby polstoročia jej vývoja sa neustále menil a dopĺňal (1 – 3), čo odráža súčasny vývoj, pri ktorom sa stierajú hranice „klasickej“ medicínskej chémie a pridružených vedných odborov, akými sú počítačový dizajn liečiv (4), kombinatorická chémia (5), farmácia a farmakológia (6) a biomolekulové testovanie (7). V *tabuľke 1* sú uvedené okrem slovenských termínov aj u nás často používané termíny v angličtine s krížovým odkazom na ich slovenské ekvivalenty. Často používané termíny v angličtine môžu pomôcť pri orientácii najmä nešpecialistom v danom odbore a študentom farmaceutických a chemických vedných odborov.

Pri príprave glosára sme sa snažili, aby termíny vyvinuli a do praxe zaviedli aj zodpovedajúce spôsoby mínmi (pokiaľ existujú) v zodpovedajúcich odborných slovenských publikáciách. Čitateľom budeme vďační vyvinuli a do praxe zaviedli aj zodpovedajúce spôsoby absencií odborných termínov.

Tabuľka 1. Základné termíny používané v medicínskej a farmaceutickej chémii

A	
Absorpcia	proces vstrebávania, pohlcovania lieku do organizmu
Acidita	kyslosť roztoku; koncentrácia vodíkových kationov (oxóniových iónov) v roztoku vyjadrená záporným dekadickým logaritmom v podobe pH (napr.: pH = 1 je veľmi kyslý roztok ($c_{(H^+)} = 10^{-1} M$), 7 ($10^{-7} M$) neutrálny a 14 ($10^{-14} M$) je veľmi bázičný (alkalický) roztok
Adsorpcia	proces viazania sa zlúčeniny na povrch iného materiálu alebo tkaniva
ADME/TOX	skratka pre farmakokinetické parametre skúmané pri liečivách: absorpcia, distribúcia, metabolismus, exkrécia a toxicita

Afinita	tendencia molekuly asociovať sa s inou molekulou; afinita liečiva je jeho schopnosť viazať sa na biologický cieľ (napr. enzým, receptor, transportný systém...)
Agonista	je opakom antagonistu (inhibitora), je to endogénna látka alebo liečivo schopné interagovať s receptorom a iniciovať fyziologickú alebo farmakologickú odpoveď charakteristickú pre tento receptor (napr. aktivácia enzýmu, kontrakcia, relaxácia, sekrécia...)
Aktivita	schopnosť zlúčeniny produkovať chemický alebo fyziologický efekt naviazaním sa takejto molekuly na biomakromolekulu
Aktivna farmaceutická ingrediencia	(angl.: API – Active Pharmaceutical Ingredient); liečivo (aktívna zložka lieku)
Aktívny transport (AT)	transport látky proti koncentračnému gradientu cez membránu. Molekula sa pohybuje z bodu s nižšou koncentráciou do bodu s vyššou koncentráciou. Môže ísť aj o prestup polárnych látok cez membránu transportným mechanizmom bunky, bez ktorej by sa látky dnu alebo von nedostali. Tento proces vyžaduje dodanie energie (napr. ATP)
Albumín	hlavný proteín plazmy (60 % celkového množstva krvných proteínov) zapojený do regulácie osmotického tlaku a transportu organických molekúl (mastné kyseliny, bilirubin, hormóny a mnohé lieky)
Alosterická regulácia	regulácia aktivity alosterických enzýmov, uplatňuje sa napr. v biochemických procesoch ako spätná regulácia (keď je výsledný produkt série biochemických premen zároveň alosterickým inhibitorom jeho počiatočného biosyntetického enzýmu. Takto nárastom koncentrácie produktu sa postupne utlmuje jeho vlastná syntéza)
Alosterické väzbové miesto	obsahujú ho mnohé enzýmy a receptory; dôsledkom väzby látky (endogénnej molekuly, alebo xenobiotika) na alosterické väzbové miesto biomakromolekuly je zmena jej konformácie, čoho dôsledkom je, že sa jej interakcia s ligandom vo väzbovom mieste môže zväčšiť alebo zmenšiť
Alosterický enzým	enzým, ktorý obsahuje oblasť mimo aktívneho miesta, na ktorú sa môžu viazať malé regulačné molekuly (efektory), čím ovplyvňujú jeho katalytickú aktivitu. Po naviazaní efektora sa katalytická aktivita enzýmu voči substrátu môže zvýšiť (efektor je aktivátorom) alebo znížiť a v takomto prípade je inhibitorom
Amesov test	metodika testovania schopnosti látky spôsobiť mutáciu DNA, ktorá môže vyvolať rakovinu
Amfifatická látka	(pozri aj amfifilná látka) molekula, ktorá obsahuje hydrofilné aj hydrofóbne skupiny
Amfifilná látka	molekula, ktorá vo svojej štruktúre kombinuje hydrofilné aj lipofilné vlastnosti
Amorfna látka	látka v tuhom skupenstve, ktorá nemá pravidelnú štruktúru (nevytvára kryštály)
Amyláza	tráviaci enzým, ktorý katalyzuje hydrolýzu škrobu (polysacharid)
Analóg	štruktúrny analóg nosnej materskej zlúčeniny (liečiva), ktorého chemické a biologické vlastnosti môžu byť veľmi odlišné (napr. obsahuje inú polohu funkčných skupín, ich iný počet, alebo má odlišné skupiny na pôvodnom skeleto)

Anión	záporne nabitý ión (napr. chloridový).
Antagonista	tiež inhibitor; je to opačne účinkujúce liečivo alebo zlúčenina, ktorá bráni vplyvu inej látky (napr. agonistu, aktivátora); antagonistu nemá vlastnú aktivitu
Antimetabolit	štruktúrny analóg medziproduktu (substrát alebo koenzým) vo fyziologicky sa vyskytujúcej kaskáde metabolických reakcií, ktorý nahradí prirodzený substrát, a tým blokuje alebo odkláňa biosyntézu fyziologicky dôležitých látok
Antitarget	pozri nedotknuteľný biologický cieľ
API	(angl.: active pharmaceutical ingredient); pozri aktívna farmaceutická ingrediencia
AUC	(angl.: area under the curve); pozri oblasť pod krivkou
B	
Bariéra	prekážka prístupu molekuly k terapeutickému miestu pôsobenia, ktorej výsledkom je znížená koncentrácia látky na mieste pôsobenia alebo oneskorený prístup (napr. bunková membrána, zvýšený metabolizmus, nevhodné pH)
Bariéra krv–mozog (BBB)	(angl.: BBB – blood-brain barrier); vrstva endotelových a iných buniek (napr. astrocytov) kapilár mozgu medzi krvou a mozgom; zamedzuje prechodu niektorých látok do tkaniva mozgu v závislosti od štruktúry látky; tiež hematoencefalická bariéra. BBB cievy sú oveľa menej priepustné ako ostatné cievy v organizme. BBB predstavuje ochranu pre mozog a CNS.
Bázicita	hladina koncentrácie vodíkových iónov v roztoku meraná zápornou logaritmicou stupnicou. pH (1 je veľmi kyslý (10^{-1} M) a 14 (10^{-14} M) je veľmi zásaditý (alkalický) roztok. Čím ochotnejšie zlúčenina prijme protón, tým je zásaditejšia (miera ochoty prijať protón súvisí s pK_a hodnotou molekuly (pK_a v staršej literatúre))
BBB	(angl.: blood-brain barrier); pozri bariéra krv – mozog
BCS	(angl.: the Biopharmaceutics Classification System); pozri biofarmaceutický klasifikačný systém
Bezpečnosť liečiva	štúdium rizika toxicity lieku
Bezpečnostné okno	tiež terapeutické okno (rozmedzie) je rozdiel medzi strednou terapeutickou koncentráciou lieku (IC_{50}) a strednou koncentráciou, o ktorej sa predpokladá, že vyvolá toxický efekt. Čím väčší rozdiel sa zistí, tým je liek bezpečnejší (pozri aj farmakogenomika)
Bioaktivita	stupeň biologickej odpovede vyvolanej po podaní látky živému organizmu, tkanivu živého organizmu alebo odozvy získanej pri biochemickom pokuse
Biofarmaceutický klasifikačný systém	(angl.: Biopharmaceutical Classification System – BCS); metóda hodnotenia rozpustnosti, permeability a dávky látky určovaná s cieľom získať súhlas regulačných agentúr na štúdie bioekvivalencie a biologickej dostupnosti
Bioinformatika	disciplína zaoberajúca sa vývojom a využitím počítačových metód na uchovávanie, analýzu a interpretáciu biologických dát

Biozostéry	skupiny zlúčenín, ktoré majú také chemické a fyzikálne vlastnosti, že vyvolajú podobný, alebo lepší biologický účinok ako pôvodne skúmaná látka, pričom ich štruktúra môže byť od nej odlišná (pozri aj stereoelektronická kompatibilita). Cieľom biozostérnej zámény je vývoj štruktúrne novej zlúčeniny s podobnými, alebo lepšími biologickými vlastnosťami, ako má pôvodná zlúčenina, alebo liečivo
Biological target	pozri biologický cieľ
Biologická aktivita mimo projektovaného biologického cieľa	(angl.: off-target activity); interakcia zlúčeniny s biomakromolekulou odlišnou od pôvodného terapeutického cieľa; často spojená s neželanými vedľajšími účinkami; niekedy môže byť aj synergická
Biologická dostupnosť	množstvo látky, ktorá sa zistí v systémovej cirkulácii po podaní zlúčeniny za určitý čas; nedostatočnosť je výsledkom chýbajúcej absorpcie do systémovej cirkulácie a / alebo rýchleho metabolického odbúravania (klírens); perorálna biologická dostupnosť súvisí s perorálnym podaním
Biologická rovnosť (ekvivalencia) liekov	lieky sú bioekvivalentné, ak podstata a rozsah terapeutických a toxických účinkov sú po podaní rovnakých dávok podobné; obvykle ide o porovnanie originálneho lieku s generickým liekom. Bez preukázania bioekvivalencie nemožno považovať generický liek za zameniteľný s originálnym liekom
Biologické liečivo	liečivo (farmakum) vyvinuté na báze biomakromolekúl, napr. proteínu, využitelné na prevenciu, terapiu alebo liečbu chorôb a poranení u ľudí (napr. bevacizumab: humanizovaná monoklonálna protilátka voči VEGF tumor aktivujúceho cytokínu)
Biologický cieľ	(angl.: biological or pharmaceutical target); endogénna biomakromolekula s terapeutickým využitím: enzým, receptor, iónový kanál alebo iný proteín v organizme, DNA, RNA..., ktorá môže byť ovplyvnená napr. organickou zlúčeninou a vyvolať požadovaný terapeutický účinok
Biologický pokus	metodika testovania, ktorou sa určí, či zlúčenina v porovnaní so štandardom vyvolá biochemickú alebo biologickú odozvu
Biologický produkt	(biologikum) zahŕňa veľké množstvo produktov, ako sú vakcíny, krv a jej komponenty, somatické bunky, tkanivá a rekombinantné proteíny využiteľné v terapii. Biologikom môžu byť cukry, proteíny, nukleové kyseliny, komplexnejšie štruktúry vytvorené ich kombináciou alebo žijúce celky, akými sú bunky a tkanivá. Biologiká sa izolujú z rôznych prírodných zdrojov – ľudských, zvieracích alebo z mikroorganizmov – a môžu sa vyrábať napr. biotechnologickými alebo inými modernými metódami. Biologiká vyvinuté na princípe génových technológií alebo buniek sú v popredí biomedicínskeho výskumu a môžu sa využiť na liečbu mnohých stavov, pri ktorých nie je dostupná iná terapia
Biomakromolekula	veľká endogénna molekula napr. DNA, RNA, proteín, enzým, receptor, glykoproteín, lipid, glykolipid..., ktorej aktiváciou alebo inhibíciou sa dosahuje požadovaná biologická odpoveď; predstavuje možný terapeutický cieľ

Biomarker	endogénna biochemická zlúčenina, ktorej koncentrácia indikuje progres choroby alebo účinnosti liečby (napr. PSA prostatisko-spezifický antigén – marker stanovovaný v súvislosti s karcinómom prostaty u mužov)
Biotechnologické liečivo	geneticky upravená napodobenina endogénnej látky z organizmu (napr. proteín)
Biotransformácia	chemická modifikácia zlúčeniny živým organizmom alebo enzýmom
Blockbuster	pozri liekový trhák
Blokácia iónového kanála	čiasťková alebo úplná inhibícia iónového kanála, ktorá sa prejavuje v tom, že ióny cez neho nemôžu prechádzať normálnou rýchlosťou
C	
Caco-2	bunková línia ľudského karcinómu hrubého čreva, ktorá sa využíva v štúdiách intestinálnej permeability
CADD	(angl. Computer Assisted Drug Design); vývoj liečiv uskutočňovaný pomocou výpočtovej techniky; využíva sa na dizajn a optimalizáciu biologicky aktívnych látok – potenciálnych liečiv
Centrálny nervový systém (CNS)	mozog a miecha
Cerebrospinal fluid (CSF)	pozri mozgovomiechový mok (likvor, CSF)
Cieľovou štruktúrou podmienené projektovanie liečiva	(angl.: structure based drug design – SBDD); štruktúrne projektovanie zlúčenín (liečiv) usku-točnené na základe dostupných informácií o priestorovom a elektrónovom usporiadaní zvolenej biomakromolekuly s cieľom identifikácie nosného skeletu (design) a zvýšenia jeho farmakologickej aktivity (optimalizácia).
CLogP	predpovedaná hodnota log P (logaritmus rozdeľovacieho koeficientu) vypočítaná zo štruktúry látky, pomáha pri výbere zlúčenín s lieku podobnými vlastnosťami
CNS – (inaktívne liečivo)	po užití liek významne nepreniká do tkaniva mozgu a miechy, čo sa prejavuje neprítomnosťou merateľného množstva látky a/alebo absenciou očakávanej farmakologickej odpovede
CNS+ (aktívne liečivo)	liek dostatočne preniká do tkaniva mozgu a miechy s merateľnou koncentráciou látky a/alebo s pozitívnou farmakologickou odpoveďou
Cytochróm (CYP)	skupina enzýmov, ktorá obsahuje hémový porfyrín s koordinovaným železom; dôležité pri respirácii buniek ako katalyzátory oxidačno-redukčných reakcií a metabolických procesov
Cytochróm P450 (CYP450)	skupina metabolických izoenzýmov cytochrómu, ktoré (absorbujú svetlo pri 450 nm) a oxidujú látky v mnohých tkanivách; majú vysoký výskyt v pečeni a podieľajú sa na metabolizme xenobiotík, biosyntéze cholesterolu a steroido-genéze; v eukaryotických organizmoch sa nachádzajú hlavne v endoplazmatickom retikule a na vnútornej strane membrány mitochondrií v bunke
Cytotoxická	stupeň schopnosti látky poškodiť alebo usmrtiť bunku

D	
Dalton	označenie pre molekulovú hmotnosť v biológii; D je hmotnostná jednotka používaná pri ató-moch a molekulách; 1 D sa rovná sa jednej dvanástine atómovej hmotnosti izotopu uhlíka ¹² C; 1 Da je ekvivalent 1 g / mol, často sa pre biomakromolekuly udáva mólová hmotnosť v kDa
Databanka štruktúr bio-makromolekúl a ich komplexov (PDB)	(angl.: PDB – protein data bank); úložisko experimentálnych trojrozmerných štruktúrnych dát veľkých biologických molekúl vrátane proteínov, nukleových kyselín a ich komplexov
Dávkovacia forma	fyzikálna kombinácia lieku obsahujúca biologicky aktívnu molekulu (API) s aditívami, ktorá je vhodná na podanie pokusným zvieratám alebo ľuďom (napr. tabletky, masť, roztok, čapík, sprej)
Dávkovacia schéma	systematický plán dávkovania (dávka, spôsob podania, frekvencia)
De novo dizajn	pozri návrh nových štruktúr bioaktívnych zlúčenín
Degradačný produkt	chemický produkt nežiaducej reakcie zlúčeniny vďaka vplyvu prostredia (napr. pri oxidácii látky vzdušným kyslíkom)
Desolvatačná pokuta	strata energie získanej z väzby ligand / biolo-gický cieľ obetovaná na desolvatáciu (uvolne-nie molekúl vód) z polárnych skupín ligandu a biologického cieľa v príslušnom aktívnom mieste (ak treba)
Disolúcia	rozpustenie látky v roztoku
Dispozícia liečiva	čo sa stane s látkou po jej podaní do organiz-mu; zahŕňa všetky procesy spojené s ADME / Tox: absorpciou, distribúciou, metaboliz-mom, exkréciou a toxicitou liekov v živých organizmoch
Distomér	enantiomér chirálnej zlúčeniny, ktorý je menej účinný pri špecifickom pôsobení v porovnaní s účinkom opačného enantioméru skúmanej látky; táto definícia nevylučuje možnosť iných efektov alebo vedľajšieho účinku distoméru (pozri aj eutomér)
Distribúcia (D)	pohyb molekúl látky v tkanivách organizmu; schopnosť lieku prejsť do krvného riečiska
Druhá fáza klinických skúšok (Ph-II)	skúšaný liek sa podáva väčšej skupine chorých ľudí (100 – 300) v zamýšľanej terapeutickej dávke; vyhodnocuje sa bezpečnosť a účinnosť lieku, overuje sa výskyt prípadných nežiaducich účinkov na väčšej skupine dobrovoľníkov, sleduje sa prípadný terapeutický efekt.
Duálne pôso-biace liečivo	zlúčenina, ktorá kombinuje dva rôzne farmako-logické efekty pri podobných efektívnych dávkach; pôsobí nezávisle na dva rôzne biologicky aktívne ciele, čo sa môže prejavíť terapeutickou synergiou jej účinku
Duálne väzbové miesto	prítomnosť dvoch rozdielnych väzbových miest ligandu na tom istom molekulovom ciele (bio-makromolekule)

Dvojito zaslepená klinická štúdia	(angl.: randomized double blind placebo control study); klinická štúdia potenciálnych, alebo aj predávaných liekov, pri ktorej ani skúmajúci lekár ani pacient nepoznajú, ktoré subjekty sú liečené aktívnou látkou a ktoré dostanú placebo. Prvým „zaslepením“ je použitie placeba a samotní pacienti nevedia, či užívajú placebo, alebo liek. Druhým „zaslepením“ je, že ani terapeut nevie, ktorá skupina pacientov užíva placebo a ktorej je podávaný skúšaný liek
Dvojnásobný prekursor liečiva	(angl.: pro-prodrug); biologicky neaktívna molekula, ktorá sa transformuje <i>in vivo</i> v dvoch krokoch (enzymaticky a/alebo chemicky) na aktívne metabolity
Dvojvrstvová membrána	dvojvrstva fosfolipidov s nepolárnou časťou orientovanou dovnútra a polárnou hlavičkou smerom do vodného prostredia (napr. intercelulárneho, ako aj do cytosólu vo vnútri bunky)
E	
EC	pozri efektívna koncentrácia
EC₅₀	(angl.: median effective concentration); polovica maximálnej efektívnej koncentrácie, ktorá vyvolá 50 % maximálnej biologickej odpovede v <i>in vitro</i> pokusoch, alebo na malých organizmoch (huby, baktérie...); výraz sa používa pre agonistov (aktivátorov) pôsobiace na receptory, kde s nárastom koncentrácie látky rastie aktivita receptora. Na rozdiel od EC ₅₀ , hodnota IC ₅₀ sa používa v súvislosti s poklesom aktivity, keď s nárastom koncentrácie látky klesá aktivita biomakromolekuly (rastie jej inhibícia)
ECF	(angl.: extracellular fluid); pozri extracelulárna tekutina
ED₅₀	(angl.: median effective dose); priemerná účinná dávka; dávka, ktorá je potrebná na vyvolanie špecifického účinku s danou intenzitou u 50 % jedincov v <i>in vivo</i> pokusoch
Efektívna dávka (ED)	(angl.: effective dose); dávka látky, ktorá vyvolá definovanú veľkosť odpovede v danom živom systéme
Efektívna koncentrácia (EC)	koncentrácia látky, ktorá vyvolá definovanú veľkosť odozvy v danom systéme
Eflux	transport látky von z bunky uskutočnený transportérom bunky s vynaložením energie (napr. ATP)
Efluxná pumpa	transportné proteíny umiestnené v membránach buniek, ktoré sú zapojené do vypudzovania látok z bunky do vonkajšieho prostredia
Efluxný pomer (ER)	permeabilita v smere sekrécie v pomere k permeabilite v smere exkrécie, pri <i>in vitro</i> testoch s použitím vrstvy buniek (napr. Caco-2)
Eliminácia	pokles koncentrácie užíteho lieku v živom organizme, spravidla metabolickou biotransformáciou a / alebo vylúčením hrubým črevom, obličkami, pľúcami, kožou alebo inými telovými tekutinami, či dýchaním (napr. anestetiká)
Eliminačná rýchlostná konštanta	kinetika prvého rádu indikujúca rýchlosť eliminácie látky používaná vo farmakokinetických štúdiách
Endogénna látka	zlúčenina, ktorá sa vyskytuje prirodzene v organizme
Endotelová vrstva	vrstva špeciálnych epitelových buniek (endotelové bunky) pokrývajúcich dutiny srdca, ciev a serózne dutiny tela

Entero-hepatálny obeh	spätňý pohyb molekúl z čreva do krvného prúdu (absorpciou), potom do pečene, čreva (biliárnou exkréciou žľazou) a znovu do krvného prúdu (absorpciou)
Enzým	protein, ktorý katalyzuje špecifickú biochemickú reakciu
Epitelová vrstva	vrstva buniek, ktoré pokrývajú vonkajší a vnútorný povrch orgánov, ciev a dutín
Európsky liekopis	súbor technických požiadaviek na prípravu, výrobu, označovanie, uchovávanie liečiv, pomocných látok, liekových foriem a na hodnotenie ich kvality
Eutomér	enantiomér chirálnej zlúčeniny, ktorý je účinnejším pri špecifickom pôsobení ako jeho opačný enantiomér (pozri aj distomér)
Excipient(y)	farmaceutické pomocné látky, plnia v lieku najrôznejšie úlohy, ale samy nemajú terapeutický účinok. Konštitutívne pomocné látky tvoria spravidla väčšinový podiel lieku, umožňujú jeho výrobu, dávajú mu tvar. Ďalšie úlohy, ktoré môžu plniť pomocné látky, sú chrániť liek pred rozkladom pri skladovaní, uľahčovať jeho podanie, riadiť uvoľnenie, vstrebanie liečiva a ďalšie
Exkrécia	vylučovanie užíteho lieku alebo metabolitov z tela obvykle močom alebo stolicou
Expozícia	koncentrácia a/alebo zotrvanie látky v organizme, tkanive alebo v <i>in vitro</i> pokuse, počas ktorého látka môže interagovať s terapeutickým cieľom
Extracelulárna tekutina (ECF)	(angl.: extracellular fluid – ECF); telová tekutina nachádzajúca sa mimo buniek. Zahŕňa plazmu a tekutiny medzi bunkami (intersticiálna tekutina)
Extrakčný pomer	frakcia látky v krvi, ktorá sa odstráni po každom prechode cez vylučovací orgán (napr. obličky, pečeň)
F	
Farmaceutická chémia	odbor farmácie, ktorý študuje vzťahy medzi chemickou štruktúrou liečiv a ich účinkom a osudom v organizme. Pomáha nachádzať nové látky využiteľné ako liečivá
Farmaceutická technológia	farmaceutický odbor, ktorý sa zaoberá formuláciou, výrobou a zabezpečením kvality liekov
Farmácia	vedný odbor zameraný na výskum liečiv a liekov, na hodnotenie a kontrolu akosti liečiv a liekov, na ich výrobu a rozdeľovanie, na organizáciu a riadenie farmaceutických funkcií
Farmakodynamika (PD)	(angl.: pharmacodynamics – PD); „čo liek (látka) urobí s organizmom“; štúdium väzby látky na biomakromolekulu, jej biochemických a fyziologických účinkov, trvanie, mechanizmus pôsobenia, vplyv koncentrácie látky na organizmus
Farmakofór	časť molekuly, ktorá je zodpovedná za jej afinitu k biologickému cieľu; priestorové usporiadanie funkčných skupín molekuly ligandu, ktoré interagujú s aktívnym miestom receptora; slúži ako templát pri syntéze biozostérnych analógov
Farmakogenetika	skúma účinok liečiva na osoby s rôznou genetickou výbavou; odlišní jedinci môžu mať odlišnú citlivosť na liečivo
Farmakogenomika	zaoberá sa systematickým skúmaním toho, ako chemické zlúčeniny modifikujú celkovú charakteristiku prepisu (expresie) génov v určitom tkanive

Farmakokinetika (PK)	(angl.: pharmacokinetics, PK); „čo telo urobí s liekom (látkou)“; zaoberá sa skúmaním a opisom osudu látok a ich metabolitov v organizme, ktorý ovplyvňuje absorpcia, distribúcia, metabolizmus, exkrécia (ADME)
Farmakológia	štúdium pôsobenia látok na organizmus, včítane biochemických interakcií, biologických účinkov a aplikácií pri liečení chorôb; zahŕňa kompozity liekov a ich vlastností, interakcie, farmakodynamiku, farmakokinetiku a toxikológiu, terapiu a medicínske aplikácie
First-pass metabolism	pozri metabolizmus prvého prechodu
Food and Drug Administration (FDA)	pozri Úrad pre kontrolu potravín a liečiv
Formulácia lieku	zmes aktívnej látky a excipientov (napr. pojidiel, stabilizátorov...), ktoré tvoria liek
Fosfolipid	lipid s funkčnou skupinou obsahujúcou fosfor. Fosfolipidy (napr. obsahujúce fosfatidylcholin) sú hlavnou súčasťou bunkových membrán (spolu s glykolipidmi, cholesterolom a proteínmi)
Fragment	molekula s nižšou molekulovou hmotnosťou ($FW \leq 300 \text{ g/mol}$), menším počtom vodíkových väzieb a heteroatómov ($NH, OH \leq 3$; $N, O \leq 6$) a miernejšou lipofilitou ($\log P \leq 3$) v porovnaní s typickým liečivom; využíva sa pri vyhľadávaní vhodných ligandov na terapeutické ciele pomocou NMR spektroskopie, povrchovej plazmónovej rezonancie (SPR) alebo röntgenovej štruktúrnej kryštalografie
G	
Gastrointestinálny systém	systém pozostávajúci zo žalúdka, tenkého a hrubého čreva
Generikum	generický liek, generický ekvivalent lieku je kópia originálneho lieku, ktorý môže byť uvedený na trh po ukončení patentovej ochrany originálneho lieku, spravidla po 20 rokoch
Genóm	predstavuje celkový genetický program organizmu; je úplný súbor chromozómových a extra-chromozómových génov organizmu, bunky, organely alebo vírusu; genóm organizmu je úplná sekvencia DNA jednej sady chromozómov
Genomika	štúdium génov a iného genetického materiálu nachádzajúceho sa v bunke, u zvierat alebo u človeka
Genotoxicita	stupeň schopnosti látky poškodiť DNA alebo chromozóm
Glomerulárna filtrácia (GFR)	prietoková rýchlosť tekutiny prechádzajúcej pri filtrácii z glomerulu do Bowmanovej kapsuly zo všetkých nefrónov obličky
Glomerulus	spleť krvných kapilár obklopený Bowmanovou kapsulou v nefróne obličky
Glukuronid	produkt reakcie kyseliny glukurónovej (zoxidovaná glukóza) s $-OH$ skupinou karboxylovej kyseliny, fenolu, alkoholu, alebo s aminoskupinou; reakcia je katalyzovaná uridindifosfátglukuronozyltransferázou (UDPGT)
Glutatión	endogénna zlúčenina (Glu-Cys-Gly), ktorá reaguje s reaktívnymi metabolitmi látok s cieľom ich detoxikácie
G-protein-coupled receptors (GPCR)	pozri receptory spriahnuté s G-proteínmi

H	
Hémová skupina	protoporfyrinový kruh (pozostávajúci zo 4 modifikovaných pyrolových heterocyklov s centrálnym atómom železa)
Hepatická portálna žila (HPV)	cieva, ktorá privádza krv zo žalúdka a čreva do pečene (<i>vena portae</i>)
Hepatický	vo vzťahu k pečeni
Hepatocyty	pečeňové bunky, v ktorých sa uskutočňuje väčšia časť metabolizmu xenobiotik; tu sa deje aj mnoho iných endogénnych biochemických reakcií
High-throughput chemistry (HTC)	pozri vysokopriepustná syntéza
High-throughput screening (HTS)	pozri vysokopriepustné testovanie je technika, ktorá umožňuje rýchlo testovať veľké množstvo látok
Hit	zlúčenina, ktorá je aktívna v HTS testoch alebo počítačových testoch nasledujúcich po virtuálnom skriningu; skutočným hitom sa stáva až po jej úplnej validácii (overenie štruktúry, čistoty a IC_{50})
Hit-to-lead	vývojový proces liečiva, v ktorom sa skúma veľké množstvo „hits“ a zaujímavé z nich sa štruktúrne upravujú s cieľom získať niekoľko zlúčenín (angl.: leads); pre optimalizačnú fázu vývoja liečiva
Homeostáza	rovnovážny stav organizmu (teplota, tlak krvi, pH krvi...)
Hydrofilita	snaha molekuly, alebo jej časti energeticky výhodne interagovať s molekulami vody (solvatovať sa)
Hydrolyza	chemická reakcia, pri ktorej sa zlúčenina rozkladá vodou (napr. hydrolyza esterov, amidov...)
CH	
Chemická biológia	aplikácia chémie na štúdium molekulových javov v biologických systémoch
Chemická databáza	špecifické elektronické úložisko na uchovávanie a vyhľadávanie chemických informácií o zlúčeninách (napr. ich štruktúry, fyzikálno-chemické vlastnosti, syntéza...). Reaxys a SciFinder sú najznámejšie veľké chemické databázy
Chemická informatika	definovaná Frankom Brownom ako využívanie (miešanie) informačných zdrojov s cieľom pretransformovať údaje na informácie a informácie na vedomosti s cieľom rýchlejšieho prijímania správnych rozhodnutí v oblasti identifikácie a optimalizácie nosných štruktúr liečiv (angl.: leads)
Chemická knižnica	knižnica zlúčenín; zbierka vzoriek (napr. chemické zlúčeniny, prírodné látky) prístupná na biologický skrining; súbor zlúčenín pripravený kombinatorickou syntézou alebo inými prostriedkami, ktoré sa rozvinuli do chemického priestoru modifikáciou základnej štruktúry
Chemický informačný softvér	umožňuje zachytiť, registrovať, vyhľadať, usporiadať a spracovať chemické informácie

Chemický priestor	súbor všetkých možných stabilných molekúl vytvorených na spoločnom základe jednej chemickej štruktúry, ktorá interaguje s jedným alebo viacerými špecifickými molekulovými cieľmi. V širšom poňatí organický chemický priestor predstavuje súbor všetkých možných stabilných molekúl, odhady ich počtu sú 10^{60} – 10^{200}
Chirálna molekula	zlúčenina, ktorá má schopnosť otáčať rovinu polarizovaného svetla
Chirálné centrum	pozri správny termín stereogénne centrum. Chiralita je vlastnosťou celej molekuly, nielen jej časti (achirálna kyselina mezovinná obsahuje 2 stereogénne centrá, ale zároveň aj rovinu symetrie a je preto achirálnou zlúčeninou)
Chromozóm	stužkovitý útvar v bunkovom jadre zložený z jednej alebo viac makromolekúl DNA a naviazaných proteínov, ktorý je nositeľom genetickej informácie
Chronický	vyskytujúci sa dlhodobo, často sa opakujúci, trvajúci dlhodobo, alebo nepretržité dlhodobé užívanie alebo expozícia
I	
IC₅₀	(angl.: median inhibitory concentration – IC ₅₀); stredná inhibičná koncentrácia látky, ktorá spôsobí 50% redukciu účinku biomakromolekuly
Imunotoxicita	toxická zapríčinená odpoveďou imunitného systému v dôsledku podania lieku (napr. imunitná reakcia vyplývajúca z reakcie metabolitu liečiva s proteínom)
In silico	uskutočnený pomocou počítačov a špeciálne vyvinutých programov
In situ	uskutočnený v prirodzenom stave (napr. v živom organizme)
In vitro	uskutočnené za laboratórnych podmienok mimo živého organizmu
In vivo	uskutočnené v živom organizme
Induced fit	pozri indukované prispôsobenie
Indukcia	zvýšenie napr. tvorby enzýmu vyvolané dávkovaním látky, ktorá aktivuje jadrový receptor, čo vedie k produkcii mRNA a syntéze väčšieho počtu kópii enzýmu
Indukované prispôsobenie	(angl.: induced fit); zmena tvaru (konformácie) biomakromolekuly aj ligandu vplyvom viazania sa ligandu s biologickým cieľom; hybnou silou je maximalizácia energetického zisku po komplexácii ligandu a biomakromolekuly; komplikuje počítačové predikcie, nakoľko výsledné priestorové usporiadanie aktívneho miesta biologického cieľa závisí od štruktúry a vlastností konkrétneho ligandu a použitie známych komplexov cieľovej biomakromolekuly s iným ligandom môže dať tak falošne negatívne, ako aj falošne pozitívne výsledky
Influx	transport molekuly do bunky transportérom za cenu spotreby energie (napr. ATP)
Inhibitor	látka, ktorá sa viaže na biomakromolekulu napr. enzým a bráni väzbe substrátu a následnej katalytickej reakcii
Iniciálna koncentrácia (C₀)	počiatočná koncentrácia látky v krvi po jej intravenóznom podaní
Inovatívne liečivo	(angl.: innovative drug); liečivo s originálnou a nepatentovanou štruktúrou pre daný biologický cieľ

Interakcia liekov (DDI)	interakcia molekúl jedného lieku s normálnou dispozíciou molekúl iného lieku po ich spoločnom podaní
Intestinálny epitel	monovrstva buniek, ktoré tvoria vnútorný povrch lúmenu zažívacieho traktu čreva
Intramuskulárny (IM)	podávaný vnútro svalovo
Intraperitoneálny (IP)	podávaný do oblasti peritonea
Intravenózný (IV)	podávaný priamo do krvného obehu žilou ako bolusová (jednorazová) injekcia alebo infúzia (postupné dávkovanie)
Intrinsic solubility	pozri prirodzená rovnovážna rozpustnosť
Ireverzibilný agonista	liečivo, ktoré pôsobí na tom istom receptore ako agonista, ale vyvolá opačný efekt
Investigational New Drug (IND) Application	žiadosť o skúšanie nového lieku (IND)
Iónová sila	miera elektrostatických interakcií medzi iónmi v elektrolyte
Iónový kanál	komplex transmembránových proteínov, ktorý slúži ako brána pre výstup alebo vstup iónov (napr. Na ⁺ , K ⁺ , Ca ²⁺ , Cl ⁻) z, alebo do bunky
Ireverzibilná inaktivácia inhibitora	(angl.: mechanism-based inactivation – MBI); ireverzibilná inaktivácia inhibitora z dôvodu vytvorenia kovalentnej alebo kvázi-ireverzibilnej väzby medzi enzýmom (napr. CYP450) a inhibítorom (alebo metabolitom inhibitora), ktorý mal v <i>in vitro</i> podmienkach schopnosť inaktivovať enzým. Takéto inhibitory sa tiež označujú ako samovražedné inhibitory
Ireverzibilná inhibícia	kovalentná alebo koordinačná väzba inhibitora na biomakromolekulu, čím sa táto následne stáva trvalo neaktívnou
Ireverzibilný inhibitor	zlúčenina, ktorá ireverzibilne inaktivuje (kovalentne alebo koordinačne) biomakromolekulu napr. receptor; takýto inhibitor obsahuje reaktívne funkčné skupiny (napr. alkylačné látky typu halogénalkánov, alebo heteroatómom aktivovaných betahalogénalkánov typu yperit, acylhalogenidov, anhydridov karboxylových kyselín, aldehydov, Michaelových akceptorov, epoxidov...)
Izostér	izostéry sú molekuly alebo ióny podobnej veľkosti, majú rovnaký počet atómov a valenčných elektrónov (napr. CO a N ₂ , ketén a diazometán)
Izozým	člen rodiny enzýmov, ktoré katalyzujú rovnaký typ reakcie, ale sa navzájom líšia primárnou štruktúrou a/alebo elektroforetickou mobilitou. Líšia sa aj rýchlosťou, za ktorej daná reakcia prebieha
K	
Kandidát na liečivo	zlúčenina, o ktorej sa predpokladá, že bude po jej vývoji schválená na klinické užívanie; látka vstupujúca do predklinického vývoja alebo I. až III. fázy klinických testov až po jej schválení príslušnou autoritou (FDA USA, EMA EU, ŠÚKL SR...)
Kapilárna elektroforéza (CE)	separačná technika využívajúca kapiláru naplnenú vodivým roztokom (tlmivý roztok) na delenie látok s rozdielnou elektroforetickou pohyblivosťou v jednosmernom elektrickom poli
Karcinogénna látka	zlúčenina vyvolávajúca rakovinu

Katión	kladne nabitý ión (napr. Na ⁺ , NH ₄ ⁺ ...)
Kazetové dávkovanie	ko-administrácia viacerých zlúčenín s cieľom vyhodnotenia viacerých farmakokinetických parametrov použitím jedného testovacieho zvieratá
K_D, K_i	(angl.: dissociation constant – K _D); disociačná konštanta ligandu; K _D je termodynamický parameter (rovnovážna konštanta disociácie) vyjadruje afinitu ligandu k receptoru v rovnovážnom stave; čím menšie K _D , tým sa viac ligand na biomakromolekulu viaže a menej z jej komplexu disociuje. (angl.: inhibitory constant, K _i); inhibičná konštanta vyjadruje väzbovú afinitu inhibítora k enzýmu. Pre nekompetitívne inhibítory enzýmov je hodnota K _i zhodná s IC ₅₀ , pričom pre kompetitívne jej hodnota môže byť ca polovičná (závisí od koncovej látky, s ktorou pri teste inhibítor súťaží, teda napr. od ATP). Čím menšia je hodnota K _i , tým je afinita látky k enzýmu väčšia. Rozdiel medzi K _i a K _D je v tom, že pokiaľ K _i (kinetický parameter) sa získa z experimentu, kde interferujú dve kinetiky (substrát / enzým a inhibítor / enzým). K _D (je termodynamický parameter) vyjadruje len afinitu ligand / biomakromolekula v rovnovážnom stave. Obe konštanty podobne vyjadrujú mieru afinity ligandu napr. k enzýmu, ich hodnoty sa môžu líšiť
K_i, K_D	pozri K _D , K _i
Klasifikácia	selekcia vecí (položiek) do tried alebo kategórií rovnakého typu
Klirens (Cl) krvi	objem krvi, z ktorého sa zlúčenina (liek) za určitú jednotku času úplne odstráni prostredníctvom rôznych eliminačných procesov; eliminované množstvo je úmerné koncentrácii lieku v krvi
Klirens (Cl) plazmy	rýchlosť eliminácie zlúčeniny (lieku) z krvi bez červených krviniek a zražacích faktorov (plazma)
Knižnica zlúčenín	súbor konkrétnych zlúčenín, napr. analógov pripravených paralelnou syntézou alebo knižnica zostavená z viacerých zdrojov určených pre HTS skríning (skríningová knižnica)
Koenzým	inak aj kofaktor; je disociovatelná nízkomolekulová neproteínová organická látka (spravidla nukleotid s nízkou molekulovou hmotnosťou, napr. NAD, NADP, koenzým A, alebo Q10...) participujúca na enzymatických reakciách ako donor, alebo akceptor elektrónov, alebo chemických skupín
Kokteil	zmes látok použitých pri <i>in vivo</i> PK kazetovom dávkovaní alebo pri <i>in vitro</i> pokusoch, ktoré súčasne vyhodnocujú viaceré látky alebo vlastnosti (napr. inhibičné pokusy s kokteilom viacerých CYP450 izoenzýmov)
Kombinatorická knižnica	súbor zlúčenín pripravených kombinatorickou syntézou
Kombinatorická syntéza	proces prípravy veľkého počtu organických zlúčenín kombinovaním súboru stavebných jednotiek
Komplementárna (antisenzná) molekula	(angl.: antisense molecule); oligonukleotid alebo jeho analóg, ktorý je komplementárny k segmentu RNA (kyselina ribonukleová) alebo DNA (kyselina deoxyribonukleová) a ktorý sa viaže na RNA alebo DNA, a tým inhibuje jej normálnu funkciu
Konforméry podmienujúca rotačná väzba	(angl.: rotatable bond – RB); jednoduchá nerigidná väzba medzi dvoma ťažkými (nevodivými) atómami zodpovedná za existenciu viacerých konformérov danej molekuly
Kongener	podobné chemické zlúčeniny pripravené v zásade rovnakými chemickými reakciami a postupmi; kongenery sú si navzájom podobné svojim pôvodom, štruktúrou alebo funkciou
Kontraión	ión s opačným nábojom voči inému iónu v roztoku alebo soli
Kooperativita	proces interakcie, pri ktorom väzba ligandu na jedno miesto makromolekuly (napr. enzým, receptor) ovplyvni väzbu ďalšej molekuly (substrátu) na inom mieste biomakromolekuly, napr. medzi väzbovým miestom substrátu v alosterickom enzýme
Kovalentné liečivo	ligand, ktorý sa viaže ireverzibilne (nevratne) na svoj molekulový cieľ za vzniku kovalentnej väzby
Krvno-mozgová bariéra (BBB)	(angl.: blood-brain barrier); pozri bariéra krv-mozog
Kryštalová forma	priestorové usporiadanie, v ktorom zlúčenina tvorí za definovaných podmienok kryštál. Zmena podmienok, za ktorých dochádza ku kryštalizácii, môže zmeniť kryštalovú mriežku. Tá istá zlúčenina potom môže vytvárať rôzne kryštály. Polymorfizmus je schopnosť tuhej látky kryštalizovať v rôznych kryštalových sústavách, ktoré majú odlišné kryštalické energie, teplotu topenia a rozpustnosť
Kvantitatívne vzťahy štruktúra – aktivita (QSAR)	proces, pri ktorom chemická štruktúra kvantitatívne koreluje s jej biologickou aktivitou; princíp QSAR analýzy spočíva v nájdení súboru fyzikálno-chemických vlastností skupiny zlúčenín, ktorými sa môže vysvetliť ich biologická aktivita
L	
LD₅₀	(angl.: median lethal dose); stredná hodnota letálnej dávky je taká koncentrácia látky, ktorá spôsobí smrť u 50 % populácie testovaných zvierat počas jej podávania
Lead compound	pozri nosná zlúčenina
Lead validation	pozri validácia nosnej zlúčeniny
Lead-like compound	pozri zlúčenina s vlastnosťami liečiva
Liečivo	farmakologicky aktívna zložka lieku (pozri API); aktívna substancia lieku uznaná oficiálnym liekopisom
Liečivu-podobný	(angl.: drug-like); majúci vlastnosti, ktoré sú podobné s vlastnosťami väčšiny komerčných liekov a vedú k prijateľnej biodostupnosti a k nízkej toxicite u ľudí
Liek	přípravok používaný v diagnostike alebo terapii ochorení. Je zložený z liečiv (účinných látok) a pomocných látok upravovaných v určitej liekovej forme (spray, masť, sirup, čapík, tableta)
Liekový produkt	(angl.: drug product); konkrétna dávkovacia forma lieku určená na užívanie
Liekový trháč	liek s ročným predajom väčším ako 1 miliarda USD

Ligand	(angl.: ligand); zlúčenina (agonista, antagoista, liek), ktorá je schopná špecificky interagovať s biologickým cieľom, viaže sa na biomakromolekulu a tvorí s ňou komplex (napr. ligand-receptor)
Ligand based drug design (LBDD)	pozri ligandovo-riadené projektovanie liečiv
Ligand efficiency (LE)	pozri ligandová efektivita
Ligandová efektivita	(angl.: ligand efficiency – LE); merne kvantifikuje afinitu molekúl k určitému biologickému cieľu; hodnota vypočítaného skóre (alebo získanej hodnoty bioaktivity napr. IC ₅₀) sa delí počtom ťažkých atómov a získa sa LE pre daný ligand. Pomocou LE možno porovnávať jednotlivé látky medzi sebou, čo je výhodné napr. pri selekcii štruktúr fragmentov pri virtuálnom testovaní
Ligandovo-riadené projektovanie liečiv (LBDD)	(angl.: ligand based drug design – LBDD); metóda objavu vývoja liečiva a/alebo jeho optimalizácia, pri ktorej sa využíva informácia z jedného, alebo viacerých ligandov, ktoré sa viažu na ten istý molekulový cieľ
Lipáza	člen rodiny enzýmov, ktoré katalyzujú hydrolyzu tukov (napr. monoacylglyceroly, triacylglyceroly) na mastné kyseliny a glycerol
Lipinského pravidlá piatich	sú pravidlá (násobky piatich) pomáhajúce vybrať tie látky, ktoré majú liečivu podobné vlastnosti (napr. biodostupnosť). Látka by mala mať nízku molekulovú hmotnosť (do 500 g/mol), byť relatívne nepochopiteľná a pri rozdeľovaní sa medzi vodnú a lipidovú fázu uprednostniť lipidovú fázu, no zároveň sa nezanedbateľne rozpúšťať vo vode (logP ≤ 5), počet HBD a HBA atómov je tiež limitovaný (NH,OH ≤ 5 a N,O ≤ 10). Lipinského pravidlá nepredpovedajú biologickú aktivitu (farmakodynamika), ale charakterizujú farmakokinetické vlastnosti látky cez jej experimentálne, alebo predpovedané fyzikálno-chemické vlastnosti
Lipofilita	afinita molekuly alebo jej časti k lipidovému (nepolárnemu) prostrediu
Log BB	log ₁₀ hodnota pomeru koncentrácie látky v mozgu k jej koncentrácii v krvi; rozdeľovací koeficient krv – mozog
Log D	log ₁₀ distribučného koeficientu rovnovážnych koncentrácií všetkých foriem (ionizovaných a neutrálnych) látky v oktán-1-ole ku koncentrácii rovnakých foriem látky vo vodnej fáze pri konkrétnom pH a teplote; líši sa od log P v tom zmysle, že sa uvažuje ionizovaná aj neutrálna forma zlúčeniny pri definovanom pH
Log P	log ₁₀ rozdeľovacieho koeficientu vyjadruje mieru odlišnej rovnovážnej rozpustnosti látky v dvoch rozpúšťadlách; väčšinou ide o rozdelenie medzi oktán-1-olom a vodou, teda zmesou čiastočne napodobňujúcou vlastnosti bunkovej membrány; je mierou lipofilných a hydrofilných vlastností skúmanej látky, hovorí o ľahkosti prestupu cez membrány a používa sa pre odhad vlastností podobných liekom pri Lipinského pravidlách piatich
Lúmen	vnútorná výstelka cievy, čriev alebo iného dutého orgánu

M	
Maximálna koncentrácia (C_{max})	maximálna koncentrácia látky v plazme, ktorá sa dosiahne po <i>in vivo</i> podaní
Maximálna tolerovaná dávka (MTD)	(angl.: maximum tolerated dose – MTD); maximálna denná (chronická) dávka, ktorú ešte tolerujú pokusné zvieratá po väčšinu svojho života bez signifikantného zhoršenia stavu alebo iného toxického účinku (okrem karcinogenity), môže sa určiť extrapoláciou z 90-dňovej štúdie
Metabolic switching	pozri metabolické prepnutie
Metabolické fenotypovanie	určenie, ktoré metabolické enzýmy a izoenzýmy metabolizujú určitú látku
Metabolické prepnutie	(angl.: metabolic switching); ak je blokováná primárna dráha metabolizmu (napr. konkrétny izoenzým, alebo jeho aktívne miesto) vzájomnou interakciou liečiv alebo chemickou modifikáciou štruktúry, potom sa uplatnia (urýchlia) alternatívne cesty metabolizmu
Metabolizmus	proces modifikácie štruktúry zlúčeniny niektorým z metabolických enzýmov v organizme s cieľom vylúčenia zlúčeniny z organizmu; metabolickými reakciami sa obyčajne zvyšuje polarita molekúl a ich rozpustnosť vo vode
Metabolizmus prvého prechodu	(angl.: first-pass metabolism); metabolizmus prvého prechodu je metabolizmus liečiv (hlavne v čreve a pečeni) skôr, než liečivo vstúpi do systémového obehu
Metabolomika	štúdium chemických procesov zahrňujúci metabolity prítomné v bunkách za daného fyziologického a vývojového stavu (metabolóm). V oblasti medicíny sa využíva hlavne na stanovenie metabolických biomarkerov ako indikátorov rôznych chorôb alebo odpovede vyvolanej liečivom. Niekedy sa používa aj pojem „metabonomika“
Metastabilný kryštál	forma kryštálu, ktorá nie je v termodynamicky najstabilnejšom stave (možná nižšia T.t. a lepšia rozpustnosť)
Micela	agregát amfifilných molekúl vo vode s hydrofilnou časťou orientovanou do vodného prostredia a hydrofóbnou časťou skrytou vo vnútri zhluku molekúl
Mikrociev	kapilárne krvné cievy (napr. v mozgu)
Mikronukleus	vezikula, ktorá je menšia ako jadro bunky a umožňuje predovšetkým uchovávanie a rekombináciu genetickej informácie
Mikrotitračné platničky	doštičky s veľkým počtom jamiek (napr. 24, 96, 384, 1536) využívaných ako testovacie skúmavky; sú štandardnou pomôckou pri biomedicínskom výskume a v klinických diagnostických testovacích laboratóriách; používa sa aj označenie mikroplatnička
Mikrozóm	vezikula pripravená z tkaniva (napr. pečene) homogenizáciou a diferenciálnou centrifugáciou, ktorá obsahuje enzýmy a ribozómy pripojené na endoplazmatické retikulum
Mnoholieková rezistencia (MDR)	(angl. multi-drug resistance – MDR); je charakteristickou vlastnosťou buniek, ktorá znamená ich rezistenciu voči viacerým skupinám liekov
Molekulová hmotnosť (MW)	súčet atómových hmotností všetkých atómov danej molekuly
Molekulová podobnosť	koincidencia alebo prekryvanie medzi štruktúrnymi a fyzikálno-chemickými parametrami zlúčenin

Molekulový cieľ	protein (napr. receptor, enzým alebo iónový kanál), DNA, RNA alebo tuky, cukry, zapojené do klinickej poruchy alebo rozvoja nežiaduceho účinku ochorenia
Molekulový deskriptor	parameter, ktorý charakterizuje špecifickú štruktúrnú vlastnosť molekuly (napr. MW, počet aromatických väzieb, logP, pK _a , dipólový moment...)
Monografia lieku	opis lieku, jeho formy dávkovania, indikácii, vedľajších účinkov a ďalších potrebných informácií
Mozgovo-miechový mok (likvor, CSF)	tekutina, ktorá sa kontinuálne vytvára v strednej časti mozgu (a je vylučovaná do tzv. kraniosakrálneho systému cez chorioidevé plexy primárne umiestnené v bočných mozgových komorách) a cirkuluje v mieche a v mozgu. Táto vyživovacia tekutina obsahuje aj biele krvinky. Likvor sa kontinuálne vytvára v plexus chorioideus mozgu, prúdi do komôr a po povrchu mozgu a miechy a vstrebáva sa do žilového systému; tlmi nárazy, bráni infekcii a udržiava konštantný tlak
Multi Drug Resistance (MDR)	pozri mnoholieková rezistencia (MDR)
Mutácia	trvalá zmena v (napr. zmena štruktúry) v DNA, čo sa pri prepise prejaví zmenenou primárnej sekvencie RNA a pri proteosyntéze zmenou sekvencie aminokyselín a možnou zmenou funkčnosti vyprodukovaných proteínov (enzýmov, receptorov...)
N	
Nanočastica	mikroskopická častica s aspoň jedným rozmerom menším ako 100 nm
Návrh na nový liek (NDA)	(angl.: new drug application – NDA); žiadosť regulačnej autorite (napr. FDA, EMA, ŠÚKL) o schválenie predaja lieku
Návrh nových štruktúr bioaktívnych zlúčenín	(<i>de novo</i> dizajn) sa uskutočňuje postupným budovaním štruktúry molekuly z jednoduchších fragmentov v rámci väzbového miesta biomakromolekuly, ktorej štruktúra je známa z údajov získaných röntgenovo-štruktúrnou alebo NMR analýzou (pozri PDB databáza)
Nedotknuteľný biologický cieľ	(angl.: antitarget); skupina dôležitých homeostázu riadiacich biomakromolekúl, ktorých aktivita sa nesmie liečivom ovplyvniť napr.: HERG draselný iónový kanál srdca, metabolické CYP P450 enzýmy, alebo transportný P-glykoproteín...
Nefelometria	metóda používaná na meranie veľkosti a koncentrácie častíc v kvapaline meraním a analýzou intenzity rozptylu svetla v kvapaline (napr. vhodná pri štúdiu rozpustnosti)
Nefrón	základná stavebná a funkčná jednotka obličky, v ktorej sa odstraňujú odpadové látky (napr. liek, metabolity) z krvi a vylučujú sa močom
Nerozpustný	majúci veľmi nízku rozpustnosť (pri liečivách hlavne vo vode)
Nešpecifická väzba	väzba zlúčeniny na lipid alebo protein tkaniva v oblasti mimo aktívneho miesta
NMR	nukleárna magnetická rezonancia; spektrálna metóda, ktorá sa využíva pri štúdiu štruktúry molekúl a ich komplexov, v medicíne je moder- nou neinvazívnou zobrazovacou metódou používanou na zobrazenie tkanív v diagnostike prakticky v každom odbore medicíny (NMR tomografia mozgu...)
Nosná zlúčenina	(angl.: lead compound); vybraná zlúčenina v procese vývoja liečiva s požadovanou biologickou aktivitou a zároveň spĺňajúcou preddefinované ADME / TOX minimálne kritériá; látka vhodná pre ďalší vývoj smerom ku kandidátovi na liečivo
Nultá fáza klinických skúšok (Ph-nullae)	klinické skúšanie, pri ktorom sa jedna dávka látky (obyčajne subterapeutická) podáva malému počtu (10 – 15) dobrovoľníkov s cieľom získania prvých informácií o biodostupnosti a počase liečiva v organizme (farmakokinetika); vyhodnocuje sa, či podaná látka sa správa u ľudí podobne, ako je predpovedané z výsledkov predklinických štúdií na zvieratách; významne redukuje čas a náklady pri rozhodovaní sa o pokračovaní ďalšieho vývoja liečiva
O	
Objasnenie štruktúry	určenie štruktúry neznámej zlúčeniny pomocou fyzikálno-chemických metód (napr. NMR, IR, MS spektroskopie)
Objav	výsledok výskumu zameraného na nájdenie zlúčenín s požadovaným biologickým účinkom na modeloch zvierat, ktoré majú potenciál stať sa liekmi v humánnej medicíne
Oblasť pod krivkou	(angl.: area under the curve – AUC); farmakokinetický termín pre plochu pod grafom koncentrácie v závislosti od času získaná pri testovaní dávky na zvierati; používa sa na hodnotenie celkovej expozície zlúčeniny v danom časovom intervale
Off-target activity	pozri biologická aktivita mimo projektovaného biologického cieľa
Optimalizácia nosnej štruktúry (lead)	vývojový proces, počas ktorého sa niekoľko „leads“ štruktúrne modifikuje a testuje s cieľom optimalizovať ich biologickú aktivitu, redukovať toxicitu a iné nežiaduce účinky, vyriešiť problémy s transportom látok do organizmu, a tým získať optimálnu štruktúru pre vhodného kandidáta na klinické testovanie
Optimalizácia štruktúry	proces návrhu, syntézy a testovania analógov nosnej zlúčeniny
Oxidačný stres	zvýšená produkcia oxidantov v živých bunkách charakterizovaná uvoľňovaním voľných radikálov kyslíka a peroxidov, ktorá vedie k poškodeniu buniek
Označovanie	(angl.: labeling); povinná informácia priložená k baleniu predpisovaných liekov (príbalový leták), ktorá obsahuje dôležité údaje pre pacientov a lekárov (dávkovanie, opatrenia, upozornenia, vedľajšie účinky...)
P	
Paracelárny transport	pohyb molekúl priestorom medzi epitelovými bunkami
Paralelná syntéza	reakcia medziproduktu s množstvom rôznych činidiel s cieľom syntézy veľkého počtu analógov
Pasívna difúzia	pohyb molekúl cez membránu bunky z oblasti s vysokou koncentráciou do oblasti s nižšou koncentráciou bez vynaloženia energie; vzhľadom na selektívnu priepustnosť membrány rôzne látky prenikajú rôznymi rýchlosťami
Patentovateľnosť	súbor kritérií, ktoré sa musia splniť, aby sa dosiahla komerčná exkluzivita objavu (napr. novosť)
PD	(angl.: pharmacodynamics); pozri farmakodynamika

PDB	(angl.: protein data bank); pozri databanka štruktúr biomakromolekúl a ich komplexov
Perfúzia	preplachovanie cievy (napr. čreva, krvných ciev mozgu) roztokom; často sa využíva na štúdium prechodu (permeácie) zlúčeniny stenou cievy
Periférne tkanivo	tkanivo situované mimo daného centrálného tkaniva; na vonkajšej strane orgánu alebo tela
Permeabilita (P_e)	schopnosť zlúčeniny prestúpiť (penetrovať) cez membránu; rýchlosť prietoku
Perorálne (PO)	užívanie lieku ústami
pH	záporný log ₁₀ koncentrácie vodíkových iónov v roztoku; miera kyslosti alebo zásaditosti roztoku; kyslý roztok pH < 7, neutrálny roztok pH = 7, alkalický roztok pH > 7
Ph-I	(angl.: Phase of clinical research I); pozri prvá fáza klinických skúšok
Ph-II	(angl.: Phase of clinical research II); pozri druhá fáza klinických skúšok
Ph-III	(angl.: Phase of clinical research III); pozri tretia fáza klinických skúšok
Ph-IV	(angl.: Phase of clinical research IV, postmarketing surveillance); pozri štvrtá fáza klinických skúšok po zavedení lieku na trh
Ph-nullae	(angl.: Phase of clinical research nullae); pozri nultá fáza klinických skúšok
Pinocytóza	jeden z možných spôsobov endocytózy, v ktorej sa molekuly transportujú z vonkajšieho prostredia do bunky vydutím cytoplazmatickej membrány dnu do bunky a následným spojením okrajov vydutiny za vzniku vezikuly s obsahom transportovanej látky
PK	(angl.: pharmacokinetics); pozri farmakokinetika
pK_A	záporný log ₁₀ disociačnej konštanty kyseliny K _A ; čím nižšia hodnota pK _A , tým je látka silnejšou kyselinou. pK _A možno použiť aj na určenie sily bázy v prípade, že sa skúma rovnovážna reakcia protonizovanej bázy na voľnú bázu a protón. V tomto prípade platí, čím vyššia hodnota pK _A (protonizovanej bázy), tým je samotná báza silnejšou bázou. Platí: ak pK _A = pH v roztoku je polovica molekúl kyseliny (alebo protonizovanej bázy) v ionizovanom stave. pK _A je univerzálnou mierou kyslých aj bázických vlastností molekúl
Placebo	neaktívna náhrada lieku, používa sa v klinických štúdiách na ich objektívnejšie vyhodnotenie (pozri tretia fáza klinických skúšok)
Plasma protein binding (PPB)	pozri väzba na proteín plazmy
Počítačová chémia	kvantitatívne modelovanie chemického správania sa na počítači metódami teoretickej chémie
Polárny povrch (PSA)	suma povrchu cez všetky polárne atómy (napr. kyslík, dusík) a k nim pripojené atómy vodíka
Pokas (t_{1/2})	čas, za ktorý sa polovica množstva dodanej látky (lieku) v živom organizme metabolizuje, alebo eliminuje biologickým procesom
Polymorfizmus	schopnosť zlúčeniny existovať vo viac ako jednej kryštalickej forme (mriežke); tieto formy majú často rôzne fyzikálne vlastnosti napr. T.t. a rozpustnosť
Pomer cena / prínos	(angl.: cost / benefit ratio); finančné zdroje potrebné na uskutočnenie určitého experimentu voči prínosu takto získaných údajov pre riešiteľský tím

Pomer krv / plazma (B / P)	(angl.: blood / plasma ratio); pomer látky v krvi k pomeru látky v plazme, ktorý sa vypočítava rôznym spôsobom, napr. pomocou AUC, C _{max} , alebo koncentrácie v stanovenom časovom bode
Predklinický vývoj	výskum uskutočnený ešte pred klinickým skúšaním kandidátov liečiva na ľuďoch
Prekursor liečiva	(angl.: prodrug); látka s nízkou biologickou aktivitou, ale lepšou biodostupnosťou, či stabilitou, ktorá sa po <i>in vivo</i> podaní metabolizuje na aktívnu látku (napr. neaktívny ester liečiva na liečivo (voľnú kyselinu) esterázami v bunke)
Prietok krvi do orgánu (Q)	rýchlosť prietoku krvi do orgánu (napr. pečče)
Primárne bunky	<i>in vitro</i> kultivované bunky získané priamo zo živého tkaniva
Prírodný produkt	zlúčenina produkovaná živým organizmom (mikroorganizmy, živočchy, rastliny), ktoré sú farmakologicky alebo biologicky aktívne a môžu sa využiť pri vývoji liekov alebo ako lieky
Prírodná rovnovážna rozpustnosť	(angl.: intrinsic solubility); (prírodná) rovnovážna rozpustnosť voľnej formy kyseliny alebo bázy ionizovateľnej zlúčeniny pri takom pH, kde je táto látka v plne neionizovanej forme
Prodrug	pozri prekursor liečiva
Proteáza	ľubovoľný typ enzýmu, ktorý katalyzuje proteolýzu (hydrolyzu) peptidových väzieb polypeptidového reťazca (degradácia proteínov)
Proteínkinázy	enzýmy, alebo s enzýmami spriahnuté receptory schopné prenášať fosfát z ATP na iné proteíny a meniť ich biologickú aktivitu, prenášať signál do bunky
Proteíny multiliekovej rezistencie (MRPs)	(angl.: multidrug resistance proteins – MRPs); skupina efluxných transportérov, špecializovaných proteínov v bunke, ktorých existencia sa prvýkrát potvrdila pri skúmaní rezistencie voči liekovej terapii pri liečbe tumorov
Proteíny plazmy	proteíny nachádzajúce sa v krvnej plazme; rôzne proteíny majúce odlišné funkcie, vrátane napr. cirkulačného transportu (pre lipidy, hormóny, vitamíny, kovy), enzýmov a komplementárnych komponentov
Proteomika	práca s polypeptidmi na úrovni genómu; skúma identitu, koncentráciu a umiestnenie endogénnych proteínov prítomných v bunke alebo organizme počas normálneho života alebo následkom podnetu (napr. expozícia zlúčeniny)
Prvá fáza klinických skúšok (Ph-I)	liek sa podáva malej skupine (20 – 100) zdravých ľudí; hľadá sa vhodná terapeutická dávka liečiva a vyhodnocuje sa jeho bezpečnosť, znášanlivosť a základné hodnoty jeho farmakokinetiky; prípadne sa sleduje aj jeho účinok; v odôvodnených prípadoch možno skúšaný liek podať aj chorému človeku
R	
Racemát	zmes rovnakého množstva pravotočivého a ľavotočivého enantioméru patriacich jednej chirálnej zlúčenine
Randomized double blind placebo control study	pozri dvojito zaslepená klinická štúdia

Reaktívny metabolit	metabolit látky, ktorý sa pri reakcii s endogénnou makromolekulou (protein, DNA) viaže kovalentnou väzbou za vzniku stabilného konjugátu; obyčajne naruší normálnu funkciu takejto biomakromolekuly
Receptor	protein v membráne bunky, cytoplazme alebo v jadre bunky, na ktorý sa viaže špecifický ligand (neurotransmitter, hormón, liek), a tým podmieni biochemickú odpoveď bunky
Receptory spriahnuté s G-proteinmi	(angl.: G-protein-coupled receptors – GPCRs); sú transmembránové receptory, ktoré viažu signálne molekuly v ich extracelulárnej oblasti, čím sa indukuje konformačná zmena receptoru v jeho intracelulárnej časti a dôjde k uvoľneniu G-proteínu a jeho podjednotiek, ktoré ďalej iniciujú kaskádu biochemických reakcií v rámci bunky
Reverzibilná inhibícia	väzba látky na enzým pomocou nekovalentných slabých interakcií (iónové, vodíkové väzby, hydrofóbne interakcie...)
Reverzibilný inhibitor	zlúčenina, ktorá sa reverzibilne viaže na enzým prostredníctvom nekovalentných interakcií (iónové väzby, vodíkové väzby, hydrofóbne interakcie) s cieľom ukotvenia inhibitora v aktívnom mieste biomakromolekuly. Množstvo slabých interakcií zabezpečí nakoniec silnú a špecifickú väzbu ligandu na biologický cieľ, čo môže umožniť inhibovať napr. väzbu enzým – substrát
Rotatable bond (RB)	pozri konforméry podmieňujúca rotačná väzba
S	
Samovražedný inhibitor	pozri ireverzibilná inaktivácia inhibitora (MBI)
Scaffold	pozri templát
Selektivita	schopnosť preferovať viazanie sa lieku na vybraný terapeutický cieľ; podmieňuje stupeň vyvolania požadovaného účinku v porovnaní s nežiaducimi vedľajšími efektmi; pomer medzi IC ₅₀ látky viazanej na iný cieľ (spojenej s potenciálnym nežiaducim účinkom) a IC ₅₀ látky viazanej na preferovaný terapeutický cieľ
Sérum	vodný roztok krvi, ktorý obsahuje rozpustené zlúčeniny a proteíny, a z ktorého sa odstránili krvné bunky a zrážacie faktory
Skúšanie aplikácie nového lieku	(angl.: investigational new drug (IND) application); žiadosť podávaná do FDA na začatie prvej fázy klinických štúdií kandidáta na liečivo
Soft liečivo	lokálne pôsobiaci aktívny syntetický derivát liečiva (napr. s dodatkovou esterickou skupinou), ktorý sa po splnení terapeutického účelu ľahko premení biotransformáciami na dobre vylúčiteľnú neaktívnu formu. Takto sa minimalizujú systémové vedľajšie účinky pôvodného liečiva
Sol' liečiva	forma liečiva, v ktorom ionizované molekuly liečiva sú spárované s iónmi opačnej polarizácie s cieľom zvýšenia rozpustnosti
Solubilizátor	látky, ktoré zvyšujú rozpustnosť zlúčenín alebo liečiva

Správna laboratórna prax (GLP)	(angl.: good laboratory practice – GLP); súbor zásad pre plánovanie prác v laboratóriu; medzinárodne dohodnutý systém zabezpečenia kontroly kvality práce a podmienok v laboratóriu, za ktorých sa neklinické štúdie plánujú, vykonávajú, overujú, zaznamenávajú, ukladajú a oznamujú; ich splnenie sa potvrdzuje vydaním osvedčenia
Správna výrobná prax (GMP)	(angl.: good manufacturing practice – GMP); proces zabezpečenia kvality produkcie medicínskych produktov v kontinuálnej výrobe v priemysle; súbor pravidiel určujúcich spôsob výroby a rozsah jej kontroly pre určenú veľkosť šarže v záujme zabezpečenia požadovanej kvality výroby liekov (výrobný predpis) umožňuje opakovane vyrábať lieky, ktoré sú bezpečné, účinné a kvalitné
Stav nalačno	stav tekutín (napr. pH, obsah žľazových solí) v gastrointestinálnom trakte po niekoľkohodinovej pauze od posledného požitia jedla
Stereo-elektronická kompatibilita	(angl.: stereoelectronic compatibility); priestorové a elektrónové rozloženie ligandu vhodné na interakciu s väzbovým miestom biologického cieľa
Stereogénne centrum	tetrahedrálne atómy napr. uhlíka (N, S, P...), ktorý má pripojené štyri rôzne substituenty, jeho nesprávny názov je chirálne centrum
Stérická zábrana	znížená reaktivita aktívneho miesta molekuly v dôsledku prítomnosti jednej alebo viacerých susedných skupín
Structural alert (SA)	pozri štruktúrna výstraha
Structure Based Drug Design (SBDD)	pozri cieľovou štruktúrou podmienené projektovanie
Subkutánne	podanie liečiva ihlou pod kožu; po vstreknutí sa látka postupne vstrebáva do krvných ciev a krvného obehu
Š	
Štruktúrna výstraha	(angl.: structural alert – SA); subštruktúra zlúčeniny, ktorá bola identifikovaná ako častý zdroj toxicity testovaných látok, napr. (NO ₂ , niekedy Br...)
Štvrtá fáza skúšok, po zavedení lieku na trh (Ph-IV)	predstavuje dohľad nad liekom po jeho zavedení na trh, zahŕňa hlásenia lekárov o pozorovaných nežiaducich účinkoch na ich pacientoch, sleduje sa dlhodobý (chronický) efekt lieku na ľuďoch
T	
Target	(angl.: biological or pharmaceutical target); pozri biologický cieľ
Tautomér	štruktúrny izomér, ktorý sa líši len polohou atómu vodíka a dvojitej väzby (napr. keto / enol tautoméria), pričom jeden izomér ľahko prechádza na druhý; tautoméry spravidla nemožno rozdeliť, lebo sa medzi nimi ľahko ustálujú rovnováha
Tautomerizmus	výraz, ktorý sa používa na vyjadrenie reverzibilnej vzájomnej premeny dvoch rôznych tautomérnych izomérov
Templát	(angl.: scaffold); je centrálna štruktúra, ktorá slúži ako predloha pre syntézu ďalších derivátov; často sa označuje aj ako základný (nosný) skelet (napr. 1H-pyrololo[2,3-b]pyridin...)
Terapeutické okno	pozri bezpečnostné okno

Terapeutický index (TI)	(angl.: therapeutic index – TI); alebo aj terapeutický pomer je pomer toxickej dávky liečiva k dávke, ktorá vyvolá terapeutický účinok (napr. EC ₅₀); používa sa ako miera relatívnej bezpečnosti lieku pri konkrétnej liečbe
Teratogenita	schopnosť určitej látky poškodiť, vyvolať znetvorenie, alebo usmrtiť vyvíjajúci sa zárodok
Therapeutic index (TI)	pozri terapeutický index
Tok	rýchlosť prúdenia molekúl cez membránu
Toxicita	vlastnosť chemických zlúčenín spočívajúca vo vyvolaní škodlivého účinku na osoby alebo zvieratá, ktoré látku požili, vdýchli, alebo absorbovali cez kožu
Transport	pohyb látky cez membránovú bariéru
Transportér	druh špecializovaných proteínov, ktoré aktívne prenášajú napr. polárne molekuly (aminokyseliny...) cez membránu bunky, ktoré by sa tam inak nedostali
Tretia fáza klinických skúšok (Ph-III)	skúšaný liek sa podáva veľkej skupine chorých ľudí (1000 – 3000 alebo viac) formou dvojito zaslepených klinických štúdií na veľkom počte kliník (angl.: randomized double blind placebo control study), teda klinických štúdií, kde ani lekár, ani pacient nevie, či bola podaná aktívna testovaná látka, alebo placebo; poskytuje konečné vyhodnotenie účinnosti a bezpečnosti nového lieku v porovnaní s najlepším dovtedy známym liečebným postupom (tzv. zlatý štandard). Výsledky takejto štúdie sa po jej vyhodnotení dajú extrapolovať na celkovú ľudskú populáciu
Tuhá disperzia	produkt, v ktorom sú dispergované jedna alebo viaceré aktívne ingrediencie v tuhej inertnej matici s cieľom zvýšenia disolučnej rýchlosti, neprerušovaného uvoľňovania liečiv, zmeny vlastností tuhého produktu, zvýšeného uvoľňovania liečiv z mastí a čapkových (čipkových) základov alebo zlepšenia rozpustnosti a stability liečiva
Turbidimetria	metóda určenia koncentrácie látky v zakalenom roztoku na základe merania poklesu intenzity svetla vyvolaného jeho rozptýlením suspendovanými časticami
Turbidita	zákal (alebo opacita) v roztoku zapríčinená suspendovanými časticami
U, Ú	
Ultrafiltrácia	metóda separácie zlúčenín s nízkou molekulovou hmotnosťou od proteínov s vysokou molekulovou hmotnosťou použitím odstredenia (centrifugácie) cez membrány, ktoré neprepúšťajú proteíny
Účinnosť	schopnosť látky vyvolať požadovaný farmakologický účinok pri pokusných zvieratách alebo u ľudí
Úrad pre kontrolu potravín a liečiv	(angl.: Food and Drug Administration – FDA); správa potravín a liečiv je vládna agentúra USA, ktorá je zodpovedná za kontrolu a reguláciu potravín, výživových doplnkov, liečiv, kozmetických prípravkov, lekárskeho prístroja, biofarmaceutických a krvných produktov
V	
Validácia nosnej zlúčeniny	(angl.: lead validation); proces, pri ktorom sa overuje očakávaná biologická aktivita nosnej zlúčeniny (lead), ako aj ďalšie požadované vlastnosti podobné liečivám

Väzba	asociácia zlúčeniny (ligandu) s biomakromolekulou (terapeutický cieľ, proteín, receptor) spojená s uvoľnením energie
Väzba na proteín plazmy (PPB)	miera, ktorou sa zlúčenina viaže na proteíny krvnej plazmy
Viazané liečivo (C_B)	molekuly liečiva, ktoré sú viazané na proteín alebo lipid
Virtuálny skríning	výber zlúčenín, ktoré sa majú viazať na receptor s využitím počítačových modelov; používa sa aj označenie „in silico“ skríning; metóda počítačového testovania veľkého množstva štruktúr na vybraný biologický cieľ; umožňuje výber takých štruktúr z knižnice, ktorých predpovedaná afinita k biologickému cieľu je výhodná
Vlastnosť	fyzikálna, chemická, biochemická alebo metabolická charakteristika látky, ktorá ovplyvňuje jej expozíciu voči biologickému cieľu, jej farmakokinetiku, alebo toxicitu
Vodíková väzba	väzba medzi elektronegatívnym atómom (napr. N, O) a atómom vodíka naviazaným na iný elektronegatívny atóm (napr. NH, OH)
Vodíkovo–vzbovový akceptor (HBA)	elektronegatívny atóm (napr. N, O), ktorý je schopný vytvoriť vodíkovú väzbu s parciálne kladne nabitým vodíkom (napr. z NH, OH)
Vodíkovo–vzbovový donor (HBD)	atóm vodíka pripojený k elektronegativnému atómu, ktorý môže tvoriť vodíkovú väzbu (napr. NH, OH)
Voľné liečivo (C_U)	koncentrácia látky v krvi, ktorá nie je viazaná na proteíny plazmy (napr. albumín) alebo lipidy, alebo tkanivá, ktoré nie sú naviazané na proteíny alebo lipidy
Vysoko-priepustná syntéza	(angl.: high-throughput chemistry – HTC); tiež kombinatorická chémia; umožňuje rýchlu prípravu veľkého počtu nových zlúčenín (derivátov) väčšinou jedným typom chemickej premeny napr. modulárnou syntézou (spájaním fragmentov – stavebných blokov)
Vysoko-priepustné testovanie	(angl.: high-throughput screening – HTS); technika, ktorá umožňuje rýchlo testovať veľké množstvo látok (napr. automatizované testovanie: 100 000/mesiac) s využitím rozsiahlych knižníc zlúčenín (napr. korporátnych zbierok)
Vývoj lieku	štúdie nasledujúce po objave molekuly s požadovanou biologickou aktivitou na modeloch zvierat, vedú k príprave a testovaniu produktov, ktoré môžu byť použité u ľudí; zahŕňujú vývoj galeník, štúdie stability a chemických procesov, humánnu farmakokinetiku, toxicitu a klinickú účinnosť
Vzťah štruktúra – aktivita	vzťah spájajúci chemickú štruktúru a farmakologickú aktivitu
Vzťah štruktúra – vlastnosť	vzťah medzi chemickou štruktúrou a ADME / Tox vlastnosťami látky
X	
Xenobiotikum	látka, ktorá sa fyziologicky nenachádza v organizme (napr. liečivo, jed, priemyselná látka) a vylučuje sa mimo neho; tiež cudzia alebo exogénna zlúčenina
X-ray structure screening	pozri X-ray štruktúrne testovanie

X-ray štruktúrne testovanie	(angl.: X-ray structure screening); metódika, keď sa hľadajú aktívne látky tak, že sa na kryštál proteínu pôsobí roztokom viacerých látok. Výsledná röntgenovo-štruktúrna analýza kryštálu ukáže, ktorý z ponúknutých ligandov poskytol s biomakromolekulou komplex a v akom priestorovom vzťahu sa látka s proteínom viaže
Z	
Zásobný roztok	(angl.: stock solution); koncentrovaný chemický roztok látky napr. v DMSO, ktorý sa tesne pred použitím riedi
Zátťažová dávka	počiatočná vysoká dávka látky podaná s cieľom dosiahnutia ustáleného stavu zlúčeniny v organizme
Zlúčenina s vlastnosťami liečiva	(angl.: drug-like compound); derivát nosnej zlúčeniny spĺňajúci fyzikálno-chemické vlastnosti, ktoré sú preddefinované ako podobné liečivám (napr. Lipinského pravidiel, biodostupnosť...)
Zwitterión	„vnútorná soľ“, molekula obsahujúca iónové skupiny s opačným nábojom, pričom je táto látka navonok elektroneutrálna

PodĎakovanie: VEGA 1/0634/13 za disemináciu farmaceutických a medicínskochemických termínov

LITERATÚRA

1. GANELLIN, R. Medicinal Chemistry in IUPAC. *Chem. Int.*, 2015; 37 (5 – 6): 17 – 20.
2. Glossary of Terms Used in Medicinal Chemistry. WERMUTH, C.G., GANELLIN, C.R., LINDBERG, P., MITSCHER, L.A. *Pure Appl. Chem.*, 1998; 70: 1129 – 1143.
3. Glossary of Terms Used in Medicinal Chemistry, Part II (IUPAC Recommendations 2013). BUCKLE, D.R., ERHARDT, P.W., GANELLIN, C.R., KOBAYASHI, T., PERUN, T.J., PROUDFOOT, J., SENN-BILFINGER, J. *Pure Appl. Chem.*, 2013; 85: 1725 – 1758, and in *Ann. Rep. Med. Chem.* Ed. M.C. Desai, Academic Press, 2013, 48: 387 – 418.

4. Glossary of Terms Used in Computational Drug Design. van de WATERBEEMD H., CARTER, R.E., GRASSY, G., KUBINYI, H., MARTIN, Y.C., TUTE, M.S., WILLET, P. *Pure Appl. Chem.*, 1997; 69: 1137 – 1152, and in *Ann. Rep. Med. Chem.*, 1998; 33: 397 – 409; Glossary of terms used in computational drug design, part II (IUPAC recommendations 2015). Martin, Y.C., Abagyan, R., Ferenczy, G.G., Gillet, V.J., Oprea, T.I., Ulander, J., Winkler, D., Zefirov, N.S. *Pure Appl. Chem.*, 2016; 88 (3): 239 – 264.
5. Glossary of Terms Used in Combinatorial Chemistry. MACLEAN, D., BALDWIN, J.J., IVANOV, V.T., KATO, Y., SHAW, A., SCHNEIDER, P., GORDON, E.M. *Pure Appl. Chem.*, 1999; 71: 2349 – 2365; and *J. Comb. Chem.*, 2000; 2: 562 – 578.
6. Glossary of Terms Related to Pharmaceutics (IUPAC Recommendations 2009). BREUER, E., CHORGHADÉ, M.S., FISCHER, J., GOLOMB, G. *Pure Appl. Chem.*, 2009; 81: 971 – 999.
7. Glossary of Terms Used in Biomolecular Screening (IUPAC Recommendations 2011). PROUDFOOT, J., NOSJEAN, O., BLANCHARD, J., WANG, J., BESSON, D., CRANKSHAW, D., GAUGLITZ, G., HERTZBERG, R., HOMON, C., LIEWELLYN, L., NEUBIG, R., WALKER, L., VILLA, P. *Pure Appl. Chem.*, 2011; 83: 1129 – 1158.

Do redakcie došlo: 11. 10. 2016

Adresa autora pre korešpondenciu:

Prof. Ing. Milan Remko, DrSc.
Katedra farmaceutickej chémie
Farmaceutická fakulta Univerzity Komenského
Odbojárov 10
32 32 Bratislava
e-mail: remko@fpharm.uniba.sk