

ИНФОРМАТОР ЗА СТУДЕНТЕ

ПРЕДМЕТ: Г 04_МЕДИЦИНСКА ХЕМИЈА И ДИЗАЈН ЛЕКОВА 2

Овај изборни предмет се слуша у зимском семестру, са два часа предавања и једним часом вежби. Предмет носи 7 ЕСПБ.

Образовни циљ предмета

Циљеви предмета су да студенти треба да овладају знањима и вештинама и да успоставе одговарајући однос према модерном дизајну лекова.

Исходи образовања

Знања које студенти треба да стекну јесу везана за упознавање метода за дизајнирање лекова и улоге код примене рачунарске и софтверске технологије за испитивање и предвиђање фармаколошких активности нових молекула (аналога лекова) у савременом дизајну.

Научиће значај коришћења интернет бази и банки података које служе за прикупљање постојећих сазнајних информација о лековима са циљем дизајнирања нових аналога са побољшаним фармаколошким карактеристикама.

Научиће које су битне особине молекула лекова које се користе у модерном дизајну лекова.

Научиће који се приступи у дизајну лекова користе у данашњој фармацеутској индустрији.

Вештине које ће стећи студенти после савладавања програма:

Током наставе студенти треба да развију рационалан приступ решавању проблема који ће им омогућити да:

користе основне хемијске софтвере који се употребљавају моделовање молекула лекова,

науче основне методе за скенирање познатих база и банки података са циљем проналажења информација о особинама фармаколошки активних супстанци

научиће да структурном хемијском формулом представе једињење и на друге начине који су релевантни за фармаколошку активност.

Упознавање и развијање наведених хемијских вештина ће омогућити да се њихов однос према дизајну лекова успостави на прави и рационалан начин, познавајући основне методе за предвиђање

фармаколошке активности како синтетисаних тако и још несинтетисаних једињења као и методе за планирање синтезе нових лекова.

Студенти после овог курса треба да буду оспособљени да у својој области усвоје основне принципе повезане са главном области, да могу применити специфично знање и вештине на основну дисциплину у реалној ситуацији, и да ће моћи да идентификују задатак, формулишу га и реше, сами или у групи.

Ставови које ће стећи студенти после савладавања програма:

сваком практичном проблему се мора прићи на систематичан и рационалан начин

унапређење квалитета рада је перманентни процес однос према колегама у лабораторији мора бити коректан

Услови слушања наставе

Да би слушао наставу на овом предмету, студент мора да буде уписан на четврту годину интегрисаних академских студија фармације.

Облици наставе

Настава се одржава кроз следеће облике: предавања, проблем-оријентисана настава, вежбе.

Руководилац предмета:

Доц. др Слободан Новокмет

Предиспитне обавезе:

Студенти су у обавези да активно учествују у свим облицима наставе. Наставници и сарадници који изводе наставу ће оцењивати њихово знање, вештину и ставове испољене приликом решавања задатих проблема.

Начин полагања испита и оцењивања:

Испит се полаже писаним путем, одговором на испитна питања. Активност студената током предавања носи до 10 поена и оцена на испиту до 90 поена.

Литература:

1. Fischer J, Ganellin CR (eds): Analogue-based Drug Discovery. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA , 2006.
2. Nogardy T, Weaver DF (eds): Medicinal Chemistry: A Molecular and Biochemical Approach, Third Edition. Oxford University Press, 2005.
3. Hermann E-C, Franke R (eds): Computer Aided Drug Design in Industrial Research, Springer-Verlag, Berlin, 1995.
4. Zupan J, Gasteiger J (eds): Neural Networks in Chemistry and Drug Design,, Wiley-VCH, Weinheim, 1999.
5. Kubinyi H, Folkers G, Martin YC (eds): 3D QSAR in Drug Design, Kluwer Academic Publishers, New York, 2000.

РАСПОРЕД ПРЕДАВАЊА У ЗИМСКОМ СЕМЕСТРУ ШКОЛСКЕ 2010/2011					
ПРЕДМЕТ: Г04-Медицинска хемја и дизајн лекова 2 Интегрисане академске студије фармације					
Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
1	Предавање: Методе дизајна лекова (подела и дефиниције)	2	Доц. др Слободан Новокмет	04.10.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
1	Вежбе: Упознавање са основним хемијским софтверима	1	Доц. др Слободан Новокмет	04.10.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 07.10.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица
Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
2	Предавање: Сличност молекула: облик, електростатички потенцијал, хидрофобност, водонична веза	2	Доц. др Слободан Новокмет	11.10.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
2	Вежбе: Екстракција молекулске сличности из два или више молекула уз употребу софтвера из хемдров-пакета	1	Доц. др Слободан Новокмет	11.10.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 12.10.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица

Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
3	Предавање: Рационални дизајн лекова у модерном истраживању-рачунарски дизајн лекова и модерна фармацевтска биотехнологија	2	Доц. др Слободан Новокмет	18.10.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
3	Вежбе: UM-BBD (од енгл.- <i>the University of Minnesota Biocatalysis and Biodegradation Database</i>) база података Универзитета у Минесоти PPS (од енгл.- <i>Pathway Prediction System</i>) URL: http://umbbd.msi.umn.edu/predict/ ReBiT (од енгл.- <i>Retro-Biosynthesis Tool</i>) база података URL: http://www.retro-biosynthesis.com	1	Доц. др Слободан Новокмет	18.10.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 19.10.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица
Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
4	Предавање: Особине лекова засноване на облику молекула (геометријске, конформационе, тополошке и стерне особине)	2	Доц. др Слободан Новокмет	25.10.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
4	Вежбе: Вежбе: Извршити претрагу интернет бази података о физичко-хемијским карактеристикама фармаколошки активних органских молекула www.organic-chemistry.org/chemicals/structuresearch.htm www.emolecules.com www.mdpi.org/molmall/search/newsearch.html www.chemindustry.com/apps/chemicals	1	Доц. др Слободан Новокмет	25.10.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 26.10.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица

Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
5	Предавање: Дизајн лекова заснован на структури аналога-структурни и фармаколошки аналози	2	Доц. др Слободан Новокмет	01.11.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
5	Вежбе: По заданом примеру претражити интернет базе података о структурним и фармаколошким аналозима	1	Доц. др Слободан Новокмет	01.11.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 02.11.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица
Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
6	Предавање: Дизајн лекова заснован на структури аналога: дизајнирање хистаминских H_{2} -антагониста	2	Доц. др Слободан Новокмет	08.11.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
6	Вежбе: По заданом примеру претражити интернет базе података о структурним и фармаколошким аналозима	1	Доц. др Слободан Новокмет	08.11.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 09.11.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица

Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
7	Предавање: Дизајн лекова заснован на структури аналога и стратегија хемогенома	2	Доц. др Слободан Новокмет	15.11.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
7	Вежбе: Одабрати аналог по избору и претражити интернет базу података	1	Доц. др Слободан Новокмет	15.11.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 16.11.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица
Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
8	Предавање: Дизајн лекова заснован на структури лиганда-Селективни бета-адренергички блокатори	2	Доц. др Слободан Новокмет	22.11.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
8	Вежбе: Одабрати аналог по избору и претражити интернет базу података	1	Доц. др Слободан Новокмет	22.11.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 23.11.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица

Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
9	Предавање: Дизајн лекова и ароматске интеракције	2	Доц. др Слободан Новокмет	29.10.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
9	Вежбе: <i>www.pdb.org</i>	1	Доц. др Слободан Новокмет	29.10.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 30.10.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица
Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
10	Предавање: Дизајн лекова заснован на приступу активног аналога	2	Доц. др Слободан Новокмет	06.12.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
10	Вежбе: Фармакофорни модел за лиганде допаминских D3-рецептора	1	Доц. др Слободан Новокмет	06.12.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 07.12.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица

Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
11	Предавање: Неуронске мреже у дизајну лекова	2	Доц. др Слободан Новокмет	13.12.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
11	Вежбе: Извршити претрагу интернет линкова (адреса) које се односе на неуронске мреже: http://groups.google.com/groups?q=comp.ai.neural-nets www2.chemie.uni-erlangen.de/publications/ANN-book/index.html	1	Доц. др Слободан Новокмет	13.12.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 14.12.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица
Недеља	Тематска јединица	Бр. часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
12	Предавање: Дизајн лекова заснован на "QSAR" методологији	2	Доц. др Слободан Новокмет	20.12.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
12	Вежбе: Моделовање молекула по избору у 3Д пољу и подела млекулских регија на основу фармаколошких особина	1	Доц. др Слободан Новокмет	20.12.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 21.12.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица

Недеља	Тематска јединица	Бр.часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
13	Предавање: Дизајн лекова заснован на "CADD" методологији	2	Доц.др Слободан Новокмет	27.12.2010. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
13	Вежбе: Моделовање молекула по избору у 3Д пољу и подела млекулских регија на основу фармаколошких особина	1	Доц.др Слободан Новокмет	27.12.2010. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 28.12.2010. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица
Недеља	Тематска јединица	Бр.часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
14	Предавање: Дизајн лекова заснован на "CoMFA" методологији	2	Доц.др Слободан Новокмет	10.01.2011. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
14	Вежбе: Моделовање молекула по избору у 3Д пољу и подела млекулских регија на основу фармаколошких особина	1	Доц.др Слободан Новокмет	10.01.2011. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 11.01.2011. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица

Недеља	Тематска јединица	Бр.часова	Наставник	Датум и време	Место наставе
15	Предавање: Амидно везивање у дизајну лекова	2	Доц.др Слободан Новокмет	17.01.2011. (Понедељак) 15:15-17:00	Зграда деканата Медицинског факултета-мала сала
15	Вежбе: Интернет база података протеинских структура	1	Доц.др Слободан Новокмет	17.01.2011. (Понедељак) 09:00-09:45 1. група 09:50-10:35 2. група 10:40-11:30 3. група 11:35-12:20 4. група 18.01.2011. (Уторак) 09:00-09:45 5. група 09:50-10:35 6. група 10:40-11:25 7. група	Зграда деканата Медицинског факултета, рачунарска учионица