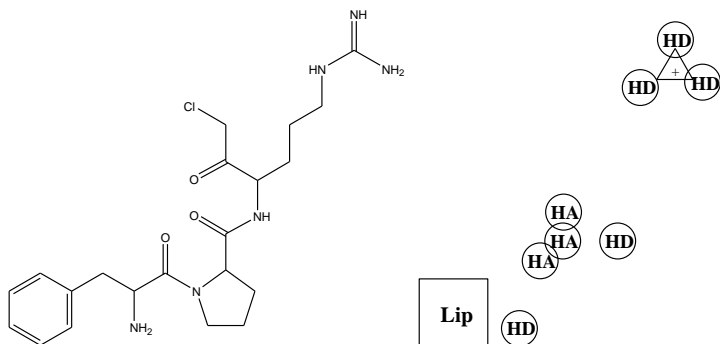


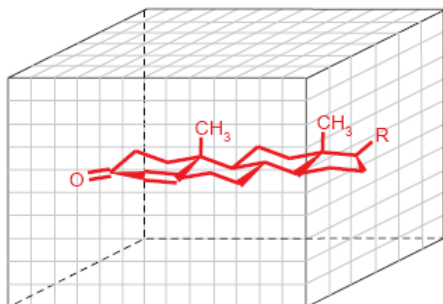
Г04 - Медицинска хемија и дизајн лекова 2

1. Навести приступе који се користе у дизајну лекова
2. Како гласи дефиниција молекула лека у дизајну лекова?
3. Како гласи дефиниција молекула сличном леку у дизајну лекова?
4. Које су особине молекула сличном леку по *Lipinski*-евом правилу петице?
5. Навести како се назива молекула лека као садржајна целина и његови фрагменти (делови).
6. Навести кораке у првој фази концептуалног приступа у дизајну лекова.
7. Навести кораке у другој фази концептуалног приступа у дизајну лекова.
8. Шта подразумева практични приступ у дизајну лекова?
9. Шта представља рационални дизајн лекова и које опште методе се користе у том дизајну?
10. Навести категорије рационалног дизајна лекова.
11. Шта представља циљни лек у дизајну заснованом на структури, који су најчешћи молекули који се дизајнирају и у ком погледу?
12. Шта се подразумева по појмом молекулска сличност на нивоу структуре и које још особине подразумева сличност молекула?
13. Схематски приказати особине молекула лека са аспекта његовог облика, електростатичког потенцијала, хидрофобности и водоничне везе.
14. Представити однос и повезаност структуре и активности молекула одговарајућим редоследом.
15. Шта су алгоритми за доковање и на чему су засновани?
16. На основу чега произилазе дескриптори и које методе користе за обраду података?
17. Шта представљају и из чега се састоје неуронске мреже?
18. Навести групе неуронских мрежа и четири основна задатка за чије извођење се примењују?
19. Који су главни задаци који се изводе помоћу неуронских мрежа?
20. Навести један тип / архитектуру неуронских мрежа и примену.
21. Шта представља наведена шема?



Г04 - Медицинска хемија и дизајн лекова 2

22. Описати шта представља наведена шема.



23. Шта описује компаративна анализа молекулског поља (*CoMFA - Comparative Molecular Field Analysis*), који главни параметар диктира одабир групе молекула и шта је најважнији предуслов?

24. Која се стратегија примењује у моделу компаративне анализе молекулског поља (*CoMFA-Comparative Molecular Field Analysis*), описати стратегију и навести пример хипотезе и подешавања фармакофоре према конформацији (лимонен).

25. Шта се дешава када се флексибилан молекул преведе у круту конформацију (погрешну геометрију) а шта када се "замрзне" његова биоактивна конформација?

26. Шта описује QSAR (од енгл.-*Quantitative Structure Activity Relationship*) методологија?

27. Шта описује 3D QSAR-метода?

28. Који су структурни параметри QSAR једначине за конгенеричку серију молекула?

29. Које особине атома или група се узимају у QSAR једначини за конгенеричку серију молекула?

30. На основу дате табеле написати како се даје најбоља процена за активност једињења б₁ тј. његову EC₅₀ вредност?

31. На основу дате табеле процена за активност једињења б₁ тј. његову EC₅₀ вредност се добија израчунавањем средње вредности свих EC₅₀ вредности у табели, и износи 7,24.

Табела. Активност различитих аналога капсаицина

Редни број	Шифра једињења	X (супституент)	EC ₅₀ (μM)	Основна структура аналога
1	ба	H	11.80 ± 1.90	
2	бб	Cl	1.24 ± 0.11	
3	бд	NO ₂	4.58 ± 0.29	
4	бе	CN	26.50 ± 5.87	
5	бф	C ₆ H ₅	0.24 ± 0.30	
6	бг	N(CH ₃) ₂	4.39 ± 0.67	
7	бх	I	0.35 ± 0.05	
8	би	NHCHO	???	

Који су подаци неопходни да би се дао одговор на питање је колико је добра претпоставка за наведену EC₅₀ вредност једињења б₁?

32. Шта је QSAR једначина?

33. Написати QSAR једначину и навести на чему је заснована?

34. Шта се описује *Free-Wilson*-овом анализом и како гласи једначина?

35. Како се још назива *Hansch*-ова анализом и како гласи једначина?

37. Шта представља мешовити приступ у QSAR једначини и навести једначину?

Г04 - Медицинска хемија и дизајн лекова 2

38. Навести параметре који се користе да би се одредиле особине молекула на основу његовог облика.
39. Шта је конформациона изомерија и шта се њоме представља?
40. Како се деле енантиомери према *Lehman*-овој дефиницији стереоселективности?
41. Како се назива однос активности између еутомера и дистомера и чиме се изражава?
42. Шта представља дистормер и какви су његови ефекти у погледу фармаколошког дејства?
43. Шта су рацемати и у којим случајевима њихова употреба има предност?
44. До чега доводи *cis/trans* изомеризација родопсина?
45. Навести фазе у дизајну лекова потпомогнутом рачунарима (*Computer-Aided Drug Design*).
46. Које су етапе у претраживању 3Д базе података?
47. Навести фазе у компјутерској процедури за моделовање фармакофоре.
48. Шта подразумева принципе за идентификацију фармакофоре употребом приступа активног аналога?
50. Шта подразумева методологију за идентификацију фармакофоре употребом приступа активног аналога?
51. Једноставна дефиниција фармакофоре је
52. Дизајн фармакофоре према структури лиганда се састоји из следећих фаза:
53. Из чега се састоји моделовање фармакофоре према структури лиганда?
54. Навести фазе интеграција *CADD* методологија.
55. Навести пример интегрисане *CADD* методологије
56. Шта обједињују интегрисане *CADD*-методологије?
57. На шта се односи суперимпозиција лиганда и шта представља?
58. Приказати шематски алгоритам за интердисциплинарни приступ према рационалном *CADD* (*Computer-Aided Drug Design*) дизајну.
59. Навести положаје (геометрије) ароматских интеракција, на основу електростатичког удела.
60. Навести типове ароматских интеракција и њихову улогу биолошким системима.
61. Шта претставља, из чега се састоји и које је геометрије ароматска π - π интеракција?
62. Шта претставља *катјон- π* интеракција?
63. Навести које интеракције постоје поред π - π *катјон- π* интеракција а значајни су фактори у стабилизацији протеинских структура и имају важну улогу у препознавању молекула и стабилизацији структура протеинских комплекса.
64. Како је добијен пронеталол - први (пионирски) неселективни антагониста бета(β)-адренергичких рецептора? Навести његову структуру и особине.
64. На којим фармаколошким профилима се заснивао развојни програм којим је добијен селективни бета-1-адренергички блокатора-атенолол?
65. На основу чије структуре је дизајниран бетаксоллол, којој генерацији бета-блокатора дизајнираних на основу аналога припада и навести његову структуру?

Г04 - Медицинска хемија и дизајн лекова 2

66. На којим фармаколошким профилима се заснивао развојни програм за дизајнирање и синтезу бетаксолла и шта је била полазна основа за синтезу?
67. Који су разлози за синтезу целипролола и навести његову структуру?
68. Како се дефинише хемогеномика и шта је њена стратегија?
69. Шта је привилегована структура и хемогеномски приступ?
70. Шта подразумева стратегију селективног подешавања нежељених дејстава?
71. Навести име и структуру прототипског лека на основу кога је извршено откриће и дефиниција (потврда) фармаколошке класе хистаминских H_{2} -рецептора и на чему се заснивао истраживачки програм за откриће анти-улкусних лекова?
72. Који је пионирски лек у групи хистаминских H_{2} -антагониста и на основу које претпоставке (хипотезе) је синтетисан?
73. Који су ресурси и почетна основа за откриће нових лекова?
74. Који су разлози за дизајнирање нових лекова засновано на структури?
75. Шта је "пионирски" лек, у чему се огледа његов значај, за шта се користи и навести пример?
76. Навести дефиницију за аналог по *IUPAC*-овом тумачењу за медицинску хемију и навести шта је директни аналог.
77. Шта претставља рационални дизајн удружен са модерном биотехнологијом и где се примењује?
78. Шта представља биолошко инжињерство и полазну основу у *de novo* дизајну?
79. Навести стратегије за дизајнирање биосинтетичких путева.
80. Написати и шематски представити шта представља комбиновање постојећих (познатих) путева биосинтезе.
81. Написати и шематски представити шта представља конструкција или инжињерство постојећих (познатих) путева биосинтеза.
82. Шематски представити *de novo* дизајнирање путева биосинтеза и навести када се користи.
83. Навести методе за ретробиосинтезу.
84. *BNICE* (од енгл.-*Biochemical Network Integrated Computational Explorer*) алгоритам.
85. Описати и шематски представити дизајнирање биосинтетског пута премошћавањем.
86. Описати и шематски представити дизајнирање хибридних биосинтетских путева комбиновањем нативних ензимских активности.
87. Описати и шематски представити дизајнирање нових биосинтетских путева и производа применом ензима са особином да делују на више супстрата.
88. Рачунарске методе и дизајнирање биосинтетских путева
89. У ком правцу и уз чије посредовање се одвија метаболизам метоурола (приказати шематски)?
90. У чему се огледа значај интра- и интер-молекуларске водонична веза?