

Студијски програм/студијски програми : ИНТЕГРИСАНЕ АКАДЕМСКЕ СТУДИЈЕ ФАРМАЦИЈЕ			
Врста и ниво студија: Интегрисане академске студије фармације, други ниво студија			
Назив предмета: Медицинска хемија и дизајн лекова 2			
Статус предмета: Обавезан			
Број ЕСПБ: 5			
Услов: Уписана четврта година студијског програма, седми семестар интегрисаних академских студија фармације			
<p>Циљ предмета: Циљеви предмета су да студенти овладају следећим знањима и вештинам из области медицинске хемије и дизајна лекова: Савремене методе за дизајн лекова; коришћење основних хемијских софтвера; фармаколошка активност хемијских једињења; веза између хемијске структуре молекула и његове фармаколошке активности; утицај 3d структуре и конформације на фармаколошку активност; фармакофора, рецептор, лиганд ; методе за моделовање фармакофоре; генетички алгоритам; анализа молекулског поља; тополошки дескриптори ; симулирање рада неурона; вештачке неуронске мреже; скенирање познатих података у циљу налажења могућег лека; стратегије за органску синтезу; планирање синтезе. Упознавање наведених области ће омогућити да се њихов однос према дизајну лекова успостави на прави и рационалан начин.</p>			
<p>Исход предмета: Знања која ће студенти стећи : Студенти ће упознати растућу улогу примене рачунара у испитивању и предвиђању фармаколошке активности молекула у савременој фармаколошкој индустрији; научиће методе за предвиђање фармаколошке активности; научиће методе за генерисање фармакофоре; упознаће примену рачунара за предвиђање синтезе фармаколошки активних молекула</p> <p>Вештине које ће студент стећи: коришћење основних хемијских софтвера који се употребљавају за синтезу лекова ; научиће основне методе за скенирање познатих база података у циљу налажења потенцијално фармаколошки активних супстанци; научиће да осим структурном хемијском формулом представе једињење и на друге начине који су релевантни за фармаколошку активност</p> <p>Ставови које ће студенти стећи после савладавања програма Сваком практичном проблему се мора прићи на систематичан и рационалан начин уз непрекидно унапређење квалитета рада, односа према колегама у лабораторији, као и мерама опреза приликом рада са хемикалијама.</p>			
<p>Садржај предмета:</p> <p><i>Теоријска настава:</i> Методе дизајна лекова, подела и дефиниције; коришћења рационалног дизајна лекова у модерном истраживању; како ујединити рачунарима помогнут дизајн лекова и модерну биотехнологију; сличност молекула, њиховог облика, електростатичког потенцијала, хидрофобности, водоничних веза; неуронске мреже у испитивању сличности молекула и везе између структуре молекула и његове фармаколошке активности; компаративна анализа молекулског поља; биолошки подаци; примена молекулске топологије на дизајн лекова; тополошки дескриптори молекулског облика; qsar методологија, тродимезионална структура; утицај стерних ефеката на фармаколошку активност; конформационо испитивање; избор релевантних конформација; мере биолошке активности; претраживање 3d података за потенцијалним лековима; порекло истраживања фармакофоре; дефинисање фармакофоре помоћу приступа активног аналога; рецептори; доковање фармакофоре; моделовање фармакофоре према рецептору; дизајн фармакофорног модела заснован на структури лиганда; моделовање фармакофоре помоћу карактеристика заснованих на структурним информацијама; генерисање фармакофоре; суперимпозиција лиганата; генетски алгоритам; представљање хромозома и генетских оператора; фитнес функција; стратегије за органску синтезу и дизајн лекова; планирање синтезе.</p> <p><i>Практична настава:</i> Увод у експериментални рад; упознавање са основним хемијским софтверима; екстракција молекулске сличности из два или више молекула; пројекција van der wals-ове површине молекула у раван; минимизација наелектрисања и енергије; синтеза лекова заснованих на бензеновом прстену; конформације прстена; ротамери, виртуално скенирање засновано на tpa-гуанин <i>trans</i>-гликозилази; примена техника за развој фармакофорног модела на примеру hiv-1 протеазе; симулација везивања естрогена; фармакофорни модел за лиганде допамин d₃ рецептора; синтеза лекова заснованих на петочланим хетеро-прстеновима; синтеза лекова заснованих на шесточланим хетеро-прстеновима; синтеза андрогених једињења; синтеза једињења повезаних са естрогеном.</p>			
<p>Литература:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Nogrady Thomas, Medicinal Chemistry: A Biochemical Approach, Oxford: Oxford University Press, 1988. • Shalom Sarel et al, Trends in Medicinal Chemistry '90, Oxford: Blackwell Scientific Publications, 1992. • R. Franke, Theoretical Drug Design Methods, Elsevier, Amsterdam, 1984. • H.D. Hoeltje and W. Sippl, Rational Approaches to Drug Design, Ed. Prous Science, Philadelphia, 2001. • E.C. Hermann and R. Franke, Computer Aided Drug Design in Industrial Research, Springer-Verlag, Berlin, 1995. • J. Zupan and J. Gasteiger, Neural Networks in Chemistry and Drug Design Wiley-VCH, Weinheim, 1999. • O.F. Guener, Pharmacophore Perception, Development, and Use in Drug Design, Ed. International University Line, 2000. 			
Број часова активне наставе: 45			Самостални рад студента: 90
Предавања:30	Вежбе:15	Други облици наставе:0	Студијски истраживачки рад:0
Методе извођења наставе: предавања, колоквијуми, вежбе			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	5	Писмени испит /	
практична настава	15	Усмени испит	50
колоквијум-и	30	
семинар-и			