

<b>Студијски програм:</b> Мастер академске студије биохемије			
<b>Назив предмета:</b> Рационални дизајн лекова		Шифра предмета: ИБ-503	
<b>Наставник:</b> Др Велимир Попсавин, редовни професор			
<b>Статус предмета:</b> Изборни			
<b>Број ЕСПБ:</b> 7			
<b>Услов:</b> Одслушана предавања и урађене вежбе из Медицинске хемије (Б-404).			
<b>Циљ предмета:</b> Упознавање са савременим методама за рационални дизајн нових биолошки активних молекула, потенцијалних лекова. Развијање практичних вештина примене компјутерских метода и алата за решавање биохемијских проблема релевантних за развој нових лекова..			
<b>Исходи предмета:</b> Након успешног завршетка овог курса студент је у стању да: Самостално проналази структуре биомолекула у хемијским и биохемијским базама података; демонстрира примену и значај принципа молекулског препознавања за рационални дизајн лекова; покаже способност за самосталну идентификацију и визуелизацију фармакофоре помоћу одабраног “Open Source” софтвера; самостално користи хемијске и биохемијске програме за идентификацију и визуелизацију лиганд-рецептор интеракција; самостално користи биохемијске програме за молекулски “docking” лиганда за рецептор и да тумачи добијене резултате.			
<b>Садржај предмета</b>			
<i>Теоријска настава:</i>			
Хемијске и биохемијске базе података од интереса за развој нових лекова. Молекулско препознавање као основа за рационални дизајн лекова. Анализа протеин-лиганда интеракција. Процес дизајнирања лекова за непознати молекулски циљ и моделовање фармакофора. Примери молекулске мимикрије код познатих биомолекула и лекова. Дизајнирање лекова када је структура њиховог молекулског циља позната (дизајн заснован на структури рецептора). Молекулски докинг и виртуелни <i>screening</i> . Рационални дизајн инхибитора HIV-1 протеазе.			
<i>Практична настава:</i>			
Претрага структурних база података на Интернету (PDB, Zinc, ChemSpider). Молекулско моделовање и геометријска оптимизација биомолекула у програмима Avogadro и Vega ZZ. Идентификација и визуелизација фармакофоре, односно лиганд рецептор интеракција у програму Accelrys Discovery Studio Visualizer. Молекулски докинг лиганда за рецептор у програму AutoDock и AutoDock Vina уз помоћ програма ADTools, AutoGrid и PyMol.			
<b>Литература</b>			
1. В. Попсавин: <i>Рационални дизајн лекова</i> , скрипта за интерну употребу, ПМФ, Нови Сад, 2010.			
2. N. Raos, S. Raić-Mailić, M. Mintas: <i>Lijekovi u prostoru – farmakofori i receptori</i> , Školska knjiga, Zagreb, 2005.			
<b>Помоћна литература:</b>			
3. D. C. Young: <i>Computational Drug Design</i> , John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, 2009.			
4. R. B. Silverman: <i>The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action</i> , 2 <sup>nd</sup> Edition, Elsevier, Amsterdam, 2004.			
<b>Електронски извори:</b>			
5. <i>Molecular Conceptor</i> , Ver. 2.15, Copyright 2001–1011, Synergix Ltd. <a href="http://www.drugdesign.com">www.drugdesign.com</a>			
6. <i>MOODLE - Sistem za podršku e-učenju</i> , PMF Novi Sad, <a href="https://moodle.pmf.uns.ac.rs/">https://moodle.pmf.uns.ac.rs/</a>			
<b>Број часова активне наставе</b>		<b>Теоријска настава:</b> 2 (укупно 30)	<b>Практична настава:</b> 3 (укупно 45)
<b>Предавања</b>	<b>Вежбе</b>		<b>ДОН</b>
	<b>Рачунске</b>	<b>Лабораторијске</b>	
2		2	1
<b>Методe извођења наставе</b>			
Предавања, компјутерске вежбе, консултације.			
<b>Оцена знања (максимални број поена 100)</b>			
<b>Предиспитне обавезе</b>		<b>Поена</b>	<b>Завршни испит</b>
Активност у току предавања		10	Писмени испит*
Практична настава		20	Усмени испит**
Семинарски задаци (2)		10	
* Урађен и одбрањен самостални практични пројекат може заменити писмени испит.			
** Усмени испит се полаже (као допуна) само уколико студент није задовољан са претходно постигнутим резултатима.			