

Табела 5.2 Спецификација предмета

Студијски програм: Мастер академске студије биохемије			
Назив предмета: РАЦИОНАЛНИ ДИЗАЈН ЛЕКОВА		Шифра:	ИБ-503
Наставник: Др Велимир Ј. Попсавин, редовни професор			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 6			
Услов: /			
Циљ предмета			
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.			
Исход предмета			
Након успешног завршетка овог курса студент је у стању да: Самостално проналази структуре биомолекула у хемијским и биохемијским базама података; демострира примену и значај принципа молекулског препознавања за рационални дизајн лекова; покаже способност за самосталну идентификацију и визуелизацију фармакофоре помоћу одабраног <i>Open Source</i> софтвера; самостално користи хемијске и биохемијске програме за идентификацију и визуелизацију лиганд-рецептор интеракција; самостално користи биохемијске програме за молекулски <i>docking</i> лиганда за рецептор и да тумачи добијене резултате.			
Садржај предмета			
<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 <i>docking</i> и виртуелни <i>screening</i> . Рационални дизајн инхибитора <i>HIV-1</i> протеазе.			
<i>Практична настава</i>			
Претрага структурних база података на <i>Internet-у</i> (<i>PDB</i> , <i>Zinc</i> , <i>ChemSpider</i>). Молекулско моделовање и геометријска оптимизација биомолекула у програмима <i>Avogadro</i> и <i>Vega ZZ</i> . Идентификација и визуелизација фармакофоре, односно лиганд рецептор интеракција у програму <i>Accelrys Discovery Studio Visualizer</i> . Молекулски докинг лиганда за рецептор у програму <i>AutoDock</i> и <i>AutoDock Vina</i> уз помоћ програма <i>ADTools</i> , <i>AutoGrid</i> и <i>PyMol</i> .			
Литература			
1. В. Попсавин: <i>Рационални дизајн лекова</i> , скрипта за интерну употребу доступна преко MOODLE сервиса ПМФ-а и на CD-у, Нови Сад, 2017.			
<i>Помоћна литература</i>			
1. D. C. Young: <i>Computational Drug Design</i> , John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, 2009.			
2. R. B. Silverman: <i>The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action</i> , 2 nd Ed., Elsevier, Amst., 2004.			
3. <i>Електронски извори: Molecular Conceptor</i> , Ver. 2.15, Copyright 2001–1011, Synergix Ltd. www.drugdesign.com .			
Број часова активне наставе	Теоријска настава:	Практична настава:	
5 (75)	2 (30)	ДОН: 2 (45), Вежбе: 1 (15)	
Методe извођења наставе			
Предавања, лабораторијске вежбе, компјутерске симулације, консултације.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	писмени испит	60
практична настава	20		
семинари	10		