

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: МАС Биохемије			
Назив предмета: Рационални дизајн лекова			Шифра: MB103
Наставник: Милош Свирчев			
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; 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 молекулско доковање лиганда за рецептор и да тумачи добијене резултате.			
Садржај предмета Теоријска настава: 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 docking и виртуелни скрининг. Рационални дизајн инхибитора HIV-1 протеазе или неке друге актуелне молекулске мете. Практична настава: 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. Молекулско доковање лиганда за рецептор у програму AutoDock и AutoDock Vina уз помоћ програма ADTools, AutoGrid и PyMol.			
Литература: 1. В. Попсавин: Рационални дизајн лекова, скрипта за интерну употребу доступна преко MOODLE сервиса ПМФ-а и на CD-у, Нови Сад, 2017. Помоћна литература 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. Електронски извори: <i>Molecular Conceptor</i> , Ver. 2.15, Copyright 2001–2011, Synergix Ltd. www.drugdesign.com			
Број часова активне наставе: 5 (75)		Теоријска настава: 2 (30)	Практична настава: ДОН: 2 (45), Вежбе: 1 (15)
Методе извођења наставе: Предавања, компјутерске вежбе и симулације, консултације.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	5	усмени испит	60
практична настава	10		
семинарски рад	25		