

## **ИНФОРМАТОР ЗА СТУДЕНТЕ**

### **ПРЕДМЕТ: Г 04\_МЕДИЦИНСКА ХЕМИЈА И ДИЗАЈН ЛЕКОВА 2**

Овај изборни предмет се слуша у зимском семестру, са два часа предавања и једним часом вежби. Предмет носи 7 ЕСПБ.

#### **Образовни циљ предмета**

Циљеви предмета су да студенти треба да овладају знањима и вештинама и да успоставе одговарајући однос према модерном дизајну лекова.

#### **Исходи образовања**

Знања које студенти треба да стекну јесу везана за упознавање метода за дизајнирање лекова и улоге код примене рачунарске и софтверске технологије за испитивање и предвиђање фармаколошких активности нових молекула (аналога лекова) у савременом дизајну. Научиће значај коришћења интернет бази и банки података које служе за прикупљање постојећих сазнајних информација о лековима са циљем дизајнирања нових аналога са побољшаним фармаколошким карактеристикама.

Научиће које су битне особине молекула лекова које се користе у модерном дизајну лекова.

Научиће који се приступи у дизајну лекова користе у данашњој фармацеутској индустрији.

#### **Вештине које ће стећи студенти после савладавања програма:**

Током наставе студенти треба да развију рационалан приступ решавању проблема који ће им омогућити да:

користе основне хемијске софтвере који се употребљавају моделовање молекула лекова,

науче основне методе за скенирање познатих база и банки података са циљем проналажења информација о особинама фармаколошки активних супстанци

научиће да структурном хемијском формулом представе једињење и на друге начине који су релевантни за фармаколошку активност.

Упознавање и развијање наведених хемијских вештина ће омогућити да се њихов однос према дизајну лекова успостави на прави и рационалан начин, познавајући основне методе за предвиђање

фармаколошке активности како синтетисаних тако и још несинтетисаних једињења као и методе за планирање синтезе нових лекова.

Студенти после овог курса треба да буду оспособљени да у својој области усвоје основне принципе повезане са главном области, да могу применити специфично знање и вештине на основну дисциплину у реалној ситуацији, и да ће моћи да идентификују задатак, формулишу га и реше, сами или у групи.

#### **Ставови које ће стећи студенти после савладавања програма:**

сваком практичном проблему се мора прићи на систематичан и рационалан начин  
унапређење квалитета рада је перманентни процес  
однос према колегама у лабораторији мора бити коректан

#### **Услови слушања наставе**

Да би слушао наставу на овом предмету, студент мора да буде уписан на четврту годину интегрисаних академских студија фармације.

#### **Облици наставе**

Настава се одржава кроз следеће облике: предавања, проблем-оријентисана настава, вежбе.

#### **Руководилац предмета:**

Доц. др Слободан Новокмет

#### **Предиспитне обавезе:**

Студенти су у обавези да активно учествују у свим облицима наставе. Наставници и сарадници који изводе наставу ће оцењивати њихово знање, вештину и ставове испољене приликом решавања задатих проблема.

**Начин полагања испита и оцењивања:**

Испит се полаже писаним путем, одговором на испитна питања.

Активност студената током предавања носи до 50 поена и оцена на испиту до 50 поена.

**Литература:**

1. Fischer J, Ganellin CR (eds): Analogue-based Drug Discovery. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA , 2006.
2. Nogardy T, Weaver DF (eds): Medicinal Chemistry: A Molecular and Biochemical Approach, Third Edition. Oxford University Press, 2005.
3. Lednicer D. The Organic Chemistry of Drug Synthesis. Vol. 7, Wiley-Interscience, John Wiley & Sons, Inc., Publication, 2007.
4. Zupan J, Gasteiger J (eds): Neural Networks in Chemistry and Drug Design,, Wiley-VCH, Weinheim, 1999.
5. Kubinyi H, Folkers G, Martin YC (eds): 3D QSAR in Drug Design, Kluwer Academic Publishers, New York, 2000.

| РАСПОРЕД ПРЕДАВАЊА У ЗИМСКОМ СЕМЕСТРУ ШКОЛСКЕ 2011/2012                                 |   |            |                          |   |  |
|---|---|------------|--------------------------|---|--|
| ПРЕДМЕТ: Г04-Медицинска хемја и дизајн лекова 2_Интегрисане академске студије фармације |   |            |                          |   |  |
| Недеља  | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                | Датум и време   | Место наставе  |
| 1   | <b>Предавање:</b><br>Методe за дизајн лекова (подела и дефиниције)  | 2          | Доц.др Слободан Новокмет | 03.10.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 1   | <b>Вежбе:</b><br>Упознавање са основним хемијским софтверима  | 1          | Доц.др Слободан Новокмет | 03.10.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>04.10.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |
| Недеља  | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                | Датум и време   | Место наставе  |
| 2   | <b>Предавање:</b><br>Сличност молекула: облик, електростатички потенцијал, хидрофобност, водонична веза         | 2          | Доц.др Слободан Новокмет | 10.10.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 2   | <b>Вежбе:</b><br>Екстракција молекулске сличности из два или више молекула употребом софтвера из хемдров-пакета | 1          | Доц.др Слободан Новокмет | 10.10.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>11.10.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |

| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                | Датум и време   | Место наставе  |
|--------|---|------------|--------------------------|---|--|
| 3      | <b>Предавање:</b><br>Рационални дизајн лекова у модерном истраживању-рачунарски дизајн лекова и модерна фармацевтска биотехнологија   | 2          | Доц.др Слободан Новокмет | 17.10.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског факултета-мала сала               |
| 3      | <b>Вежбе:</b><br>UM-BBD (од енгл.- <i>the University of Minnesota Biocatalysis and Biodegradation Database</i> ) база података Универзитета у Минесоти<br>PPS (од енгл.- <i>Pathway Prediction System</i> )<br><b>URL:</b> <a href="http://umbbd.msi.umn.edu/predict/">http://umbbd.msi.umn.edu/predict/</a><br>ReBiT (од енгл.- <i>Retro-Biosynthesis Tool</i> ) база података<br><b>URL:</b> <a href="http://www.retro-biosynthesis.com">http://www.retro-biosynthesis.com</a>  | 1          | Доц.др Слободан Новокмет | 17.10.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>18.10.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског факултета,<br>рачунарска учионица |
| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                | Датум и време   | Место наставе  |
| 4      | <b>Предавање:</b><br>Особине лекова засноване на облику молекула (геометријске, конформационе, тополошке и стерне особине)  | 2          | Доц.др Слободан Новокмет | 24.10.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског факултета-мала сала               |
| 4      | <b>Вежбе:</b><br>Извршити претрагу интернет бази података о физичко-хемијским карактеристикама фармаколошки активних органских молекула<br><a href="http://www.organic-chemistry.org/chemicals/structuresearch.htm">www.organic-chemistry.org/chemicals/structuresearch.htm</a><br><a href="http://www.emolecules.com">www.emolecules.com</a><br><a href="http://www.mdpi.org/molmall/search/newsearch.html">www.mdpi.org/molmall/search/newsearch.html</a><br><a href="http://www.chemindustry.com/apps/chemicals">www.chemindustry.com/apps/chemicals</a> | 1          | Доц.др Слободан Новокмет | 24.10.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>25.10.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског факултета,<br>рачунарска учионица |

| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                 | Датум и време   | Место наставе  |
|--------|---|------------|---------------------------|---|--|
| 5      | <b>Предавање:</b><br>Дизајн лекова заснован на структури аналога-структурни и фармаколошки аналози            | 2          | Доц. др Слободан Новокмет | 31.10.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 5      | <b>Вежбе:</b><br>По заданом примеру претражити интернет базе података о структурним и фармаколошким аналозима | 1          | Доц. др Слободан Новокмет | 31.10.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>01.11.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |
| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                 | Датум и време   | Место наставе  |
| 6      | <b>Предавање:</b><br>Дизајн лекова заснован на структури аналога: дизајнирање хистаминских $H_2$ -антагониста | 2          | Доц. др Слободан Новокмет | 07.11.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 6      | <b>Вежбе:</b><br>По заданом примеру претражити интернет базе података о структурним и фармаколошким аналозима | 1          | Доц. др Слободан Новокмет | 07.11.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>08.11.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |

| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                 | Датум и време   | Место наставе  |
|--------|---|------------|---------------------------|---|--|
| 7      | <b>Предавање:</b><br>Дизајн лекова заснован на структури аналога и стратегија хемогенома                | 2          | Доц. др Слободан Новокмет | 14.11.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 7      | <b>Вежбе:</b><br>Одабрати аналог по избору и претражити интернет базу података                          | 1          | Доц. др Слободан Новокмет | 14.11.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>15.11.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |
| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                 | Датум и време   | Место наставе  |
| 8      | <b>Предавање:</b><br>Дизајн лекова заснован на структури лиганда-Селективни бета-адренергички блокатори | 2          | Доц. др Слободан Новокмет | 21.11.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 8      | <b>Вежбе:</b><br>Одабрати аналог по избору и претражити интернет базу података                          | 1          | Доц. др Слободан Новокмет | 21.11.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>22.11.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |

| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                 | Датум и време   | Место наставе  |
|--------|---|------------|---------------------------|---|--|
| 9      | <b>Предавање:</b><br>Дизајн лекова и ароматске интеракције                  | 2          | Доц. др Слободан Новокмет | 28.11.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 9      | Вежбе:<br><i>www.pdb.org</i>  | 1          | Доц. др Слободан Новокмет | 28.11.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>29.11.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |
| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                 | Датум и време   | Место наставе  |
| 10     | <b>Предавање:</b><br>Дизајн лекова заснован на приступу активног аналога    | 2          | Доц. др Слободан Новокмет | 05.12.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 10     | <b>Вежбе:</b><br>Фармакофорни модел за лиганде допаминских $D_3$ -рецептора | 1          | Доц. др Слободан Новокмет | 05.12.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>06.12.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |

| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                 | Датум и време   | Место наставе  |
|--------|---|------------|---------------------------|---|--|
| 11     | <b>Предавање:</b><br>Неуронске мреже у дизајну лекова   | 2          | Доц. др Слободан Новокмет | 12.12.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 11     | <b>Вежбе:</b><br>Извршити претрагу интернет линкова (адреса)<br>које се односе на неуронске мреже:<br><br><a href="http://groups.google.com/groups?q=comp.ai.neural-nets">http://groups.google.com/groups?q=comp.ai.neural-nets</a><br><br><a href="http://www2.chemie.uni-erlangen.de/publications/ANN-book/index.html">www2.chemie.uni-erlangen.de/publications/ANN-book/index.html</a> | 1          | Доц. др Слободан Новокмет | 12.12.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>13.12.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |
| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                 | Датум и време   | Место наставе  |
| 12     | <b>Предавање:</b><br>Дизајн лекова заснован на "QSAR" методологији  | 2          | Доц. др Слободан Новокмет | 19.12.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 12     | <b>Вежбе:</b><br>Моделовање молекула по избору у 3Де пољу и<br>подела молекулских регија на основу<br>фармаколошких особина   | 1          | Доц. др Слободан Новокмет | 19.12.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>20.12.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |



| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                 | Датум и време   | Место наставе  |
|--------|---|------------|---------------------------|---|--|
| 13     | <b>Предавање:</b><br>Дизајн лекова заснован на "CADD" методологији  | 2          | Доц. др Слободан Новокмет | 26.12.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 13     | <b>Вежбе:</b><br>Моделовање молекула по избору у 3Де пољу и подела молекулских регија на основу фармаколошких особина | 1          | Доц. др Слободан Новокмет | 26.12.2011. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>27.12.2011. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |
| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                 | Датум и време   | Место наставе  |
| 14     | <b>Предавање:</b><br>Дизајн лекова заснован на "CoMFA" методологији   | 2          | Доц. др Слободан Новокмет | 15.01.2012. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 14     | <b>Вежбе:</b><br>Моделовање молекула по избору у 3Де пољу и подела молекулских регија на основу фармаколошких особина | 1          | Доц. др Слободан Новокмет | 15.01.2012. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>16.01.2012. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |

| Недеља | Тематска јединица   | Бр. часова | Наставник                    | Датум и време   | Место наставе  |
|--------|---|------------|------------------------------|---|--|
| 15     | <b>Предавање:</b><br>Значај амидног везивања у дизајну лекова | 2          | Доц. др Слободан<br>Новокмет | 22.01.2012. ( <b>Понедељак</b> )<br>15:15-17:00   | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета-мала<br>сала               |
| 15     | <b>Вежбе:</b><br>Интернет база података протеинских структура | 1          | Доц. др Слободан<br>Новокмет | 22.01.2012. ( <b>Понедељак</b> )<br>09:00-09:45 1. група<br>09:50-10:35 2. група<br>10:40-11:30 3. група<br>11:35-12:20 4. група<br>23.01.2012. ( <b>Уторак</b> )<br>09:00-09:45 5. група<br>09:50-10:35 6. група<br>10:40-11:25 7. група | Зграда деканата<br>Медицинског<br>факултета,<br>рачунарска<br>учионица |