

Temeljni predmet:**MOLEKULARNE OSNOVE FARMACEVTSKE KEMIJE**

Urnik izvajanja v študijskem letu 2012/2013

Nosilec: izr. prof. dr. Marko Anderluh**Izvajalci:** izr. prof. dr. Marko Anderluh, prof. dr. Slavko Pečar, prof. dr. Marija Sollner-Dolenc, prof. dr. Tomaž Šolmajer, prof. dr. Danijel Kikelj, izr. prof. dr. Lucija Peterlin Mašič, doc. dr. Anamarija Zega, prof. dr. Aleš Obreza, doc. dr. Janez Ilaš, doc. dr. Janez Mravljak, doc. dr. Simona Golič Grdadolnik, prof. dr. Stanislav Gobec, doc. dr. Zdenko Časar**Število KT:** 30

Predmet sestavljajo trije moduli po 10 KT.

Modul1: Struktura učinkovin in njihove lastnosti

F-1-202 Modul2: Struktura učinkovin in biološka aktivnost

F-1-203 Modul3: Učinkovine in njihove tarče

Modul 1: Struktura učinkovin in njihove lastnosti**Koordinator:** izr. prof. dr. Marko Anderluh

Datum	Ura	Predavatelj in vsebina	Lokacija
11.10.2012	15h – 19h	Anderluh 5 ur: -uvod, razdelitev seminarjev -medmolekulske interakcije -kovalentni inhibitorji/antagonisti	FFA-P4
18.10.2012	15h – 19h	Šolmajer 3 ur, Perdih 2 uri: -struktura in molekularni dekriptorji -računanje/napovedovanje lastnosti	FFA-P4
25.10.2012	15h – 19h	Šolmajer 3 ure, Perdih 2 uri: -osnove kvantne kemije in empiričnega polja sil -molekularno modeliranje	FFA-P4
8.11.2012	15h – 19h	Obreza 3 ure: -fiz.-kem. lastnosti: lipofilnost, polarnost, hidrofobnost, logP, kislost, bazičnost, pKa Anderluh 2 uri: -raztapljanje, topnost	FFA-P4
15.11.2012	15h – 19h	Pečar 3 ure: -lipidna peroksidacija in oksidativni stres -fotosenzibilizatorji kot učinkovine -označene učinkovine Zega 2 uri: -konformacijska analiza v realnem času	FFA-P4
22.11.2012	15h – 19h	Pečar 3 ure: -radikali in radikalske reakcije -učinkovine in reaktivni intermedijati -antioksidanti -radikali v metabolizmu učinkovin -radikalske poškodbe celičnih sestavin Anderluh 2 uri	FFA-P4

		-intrinzične lastnosti značilne za zdravilne učinkovine	
29.11.2012	15h – 19h	Kikelj 3 ure: -kiralnost-fizikalne/biološke lastnosti Časar 2 uri: -polimorfizem ZU – vpliv na topnost in biološko uporabnost, načrtovanje in analitika polimorfizmov	FFA-P4
6.12.2012	15h – 19h	Seminarji	FFA-P4

Modul 2: Tarče učinkovin in vrednotenje interakcij
Koordinatorica: doc. dr. Anamarija Zega

Datum	Ura	Predavatelj in vsebina	Lokacija
14.12.2012	15h – 19h	Zega uvod, razdelitev seminarjev Zega 2 uri Tarče (validacija tarč, druggability..) Pečar 3 ure Medmolekulske prepoznavanje (Specifične, nespecifične interakcije)	FFA-P4
21.12.2012	15h – 19h	Zega, Ilaš 5 ur Vrednotenje interakcij med učinkovino in tarčo (Biološke <i>in vitro</i> metode-na encimih, receptorjih, izoliranih tkivih, celicah; SPR, ITC)	FFA-P4/P5
3.1.2013	15h – 19h	Kikelj 3 ure Receptorji kot tarče Anderluh 2 ura Jedrni receptorji	FFA-P4/P5
10.1.2013	15h – 19h	Zega, Gobec 5 ur Encimi kot tarče	FFA-P4/P5
17.1.2013	15h – 19h	Peterlin-Mašič 3 ure Nukleinske kisline kot tarče RNK, DNK Mravljak: 2 uri Membrane kot tarče	FFA-P4
21.2.2013	15h – 19h	Anderluh 3 ure Ionski kanali kot tarče Zega 2 uri Rentgenska kristalografija	FFA-P4
28.2.2013	15h – 19h	Golič-Grdadolnik 3 ure Uporaba NMR spektroskopije pri načrtovanju zdravilnih učinkovin Tomašič 2 uri Homologni modeli	FFA-P4
7.3.2013	15h – 19h	Seminarji	FFA-P4

Modul 3: Metode načrtovanja učinkovin
Koordinatorica:izr. prof. dr. Lucija Peterlin Mašič

Datum	Ura	Predavatelj in vsebina	Lokacija
14.3.2013	15h – 19h	Peterlin Mašič 1 ura: uvod, razdelitev seminarjev Kikelj 3 ure: - Definicija in opredelitev spojine vodnice Kikelj 1 uri: - Multipli ligandi	FFA-P4
21.3.2013	15h – 19h	Sollner-Dolenc 3 ure: Mimetiki (peptidomimetiki, glikomimetiki) in mimetični koncepti Kikelj 2 uri: Načrtovanje novih učinkovin na osnovi naravnih spojin	FFA-P4/P5

28.3.2013	15h – 19h	Šolmajer 3 ure: - virtualno reševanje Gobec 2 uri: - vrednotenje knjižnic spojin	FFA-P4/P5
4.4.2013	15h – 19h	Zega 5 ur: - Načrtovanje na osnovi fragmentov (Fragment based drug design) - bioizosterija in biološka aktivnost - "scaffold hopping" - Načrtovanje na osnovi analogov (analog based drug design)	FFA-P4
11.4.2013	15h – 19h	Perdih 3 ure: - farmakoforni modeli Peterlin Mašič 2 uri: - Predzdravila in biološka aktivnost metabolitov	FFA-P4
18.4.2013	15h – 19h	Peterlin Mašič 5 ur: - Napovedovanje toksičnosti (citotoksičnost, kardiotoksičnost, genotoksičnost, hepatotoksičnost), - pomen poznavanja toksiformnih skupin in metaboličnih pretvorb v zgodnjih fazah razvoja novih učinkovin	FFA-P4
25.4.2013	15h – 19h	Urleb 2 uri: Industrijski pogled na načrtovanje novih učinkovin Gobec 3 ure: Novi trendi in primeri pri načrtovanju novih učinkovin	FFA-P4
9.5.2013	15h – 19h	Predstavitve seminarjev	FFA-P4

Legenda predavalnic:

FFA – P4: Fakulteta za farmacijo UL, Aškerčeva 7, Ljubljana, predavalnica 4

FFA – P5: Fakulteta za farmacijo UL, Aškerčeva 7, Ljubljana, predavalnica 5