

Temeljni predmet:**MOLEKULARNE OSNOVE FARMACEVSTKE KEMIJE***Urnik izvajanja predmeta v študijskem letu 2013/2014***Nosilec:** izr. prof. dr. Marko Anderluh**Izvajalci:** prof. dr. Slavko Pečar, prof. dr. Marija Sollner-Dolenc, prof. dr. Tomaž Šolmajer, prof. dr. Danijel Kikelj, izr. prof. Stanislav Gobec, izr. prof. dr. Aleš Obreza, izr. prof. dr. Lucija Peterlin Mašič, doc. Anamarija Zega, izr. prof. dr. Marko Anderluh in drugi izvajalci.**Število KT:** 30

Predmet sestavljajo trije moduli po 10 KT.

Modul1: Struktura učinkovin in njihove lastnosti

Modul2: Struktura učinkovin in biološka aktivnost

Modul3: Učinkovine in njihove tarče

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

Datum	Ura	Predavatelj in vsebina	Lokacija
10.10.2013	15h – 19h	Anderluh 5 ur: -uvod, razdelitev seminarjev -medmolekulske interakcije -kovalentni inhibitorji/antagonisti	FFA-P4
17.10.2013	15h – 19h	Anderluh/Lah 3 ure: -termodinamske osnove interakcij učinkovina-receptor -uporaba izotermalne titracijske kalorimetrije pri vrednotenju interakcij ligand-receptor Anderluh 2 uri: -intrinzične lastnosti značilne za zdravilne učinkovine	FFA-P4
24.10.2013	15h – 19h	Šolmajer 3 ur, Perdih 2 uri: -struktura in molekularni dekriptorji -računanje/napovedovanje lastnosti	FFA-P4
7.11.2013	15h – 19h	Šolmajer 3 ura, Perdih 2 uri: -osnove kvantne kemije in empiričnega polja sil -molekularno modeliranje	FFA-P4
14.11.2013	15h – 19h	Obreza 2 uri: -fiz.-kem. lastnosti: lipofilnost, polarnost, hidrofobnost, logP, kislost, bazičnost, pKa Anderluh 2 uri: -raztapljanje, topnost Zega 2 uri: -konformacijska analiza v realnem času	FFA-P4
21.11.2013	15h – 19h	Pečar 5 ur: -lipidna peroksidacija in oksidativni stres	FFA-P4

		-fotosenzibilizatorji kot učinkovine -označene učinkovine -radikali in radikalske reakcije -učinkovine in reaktivni intermediati -antioksidanti -radikali v metabolizmu učinkovin -radikalske poškodbe celičnih sestavin	
28.11.2013	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
5.12.2013	15h – 19h	Seminarji	FFA-P4

Modul 2: Struktura učinkovin in biološka aktivnost
Koordinatorica: doc. dr. Anamarija Zega

Datum	Ura	Predavatelj in vsebina	Lokacija
13.12.2013	15h – 19h	Zega uvod, razdelitev seminarjev Zega 2 uri Tarče (validacija tarč, druggability..) Pečar 3 ure Medmolekulsko prepoznavanje (Specifične, nespecifične interakcije)	FFA-P4
20.12.2013	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
2.1.2014	15h – 19h	Kikelj 3 ure Receptorji kot tarče Anderluh 2 uri Jedrni receptorji	FFA-P4
9.1.2014	15h – 19h	Zega/Gobec 5 ur Encimi kot tarče	FFA-P4
16.1.2014	15h – 19h	Peterlin-Mašič 3 ure Nukleinske kisline kot tarče RNK, DNK Mravljak: 2 uri Membrane kot tarče	FFA-P4
20.2.2014	15h – 19h	Anderluh 3 ure Ionski kanali kot tarče Šink 2 uri Rentgenska kristalografija	FFA-P4
27.2.2014	15h – 19h	Golič-Grdadolnik 3 ure Uporaba NMR spektroskopije pri načrtovanju zdravilnih učinkovin Tomašič 2 uri Homologni modeli	FFA-P4
6.3.2014	15h – 19h	Seminarji	FFA-P4

Modul 3: Učinkovine in njihove tarče
Koordinatorica:izr. prof. dr. Lucija Peterlin Mašič

Datum	Ura	Predavatelj in vsebina	Lokacija
13.3.2014	15h – 19h	Peterlin Mašič 1 ura: uvod, razdelitev seminarjev	FFA-P4

		Kikelj 3 ure: - Definicija in opredelitev spojine vodnice Kikelj 1 uri: - Multipli ligandi	
20.3.2014	15h – 19h	Sollner-Dolenc 3 ure: Mimetiki (peptidomimetiki, glikomimetiki) in mimetični koncepti Kikelj 2 uri: Načrtovanje novih učinkovin na osnovi naravnih spojin	FFA-P4
27.3.2014	15h – 19h	Solmajer 3 ure: - virtualno rešetanje Gobec 2 uri: - vrednotenje knjižnic spojin	FFA-P4
3.4.2014	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
10.4.2014	15h – 19h	Perdih 3 ure: - farmakoforni modeli Peterlin Mašič 2 uri: - Predzdravila in biološka aktivnost metabolitov	FFA-P4
17.4.2014	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
24.4.2014	15h – 19h	Urleb 2 uri: Industrijski pogled na načrtovanje novih učinkovin Gobec 3 ure: Novi trendi in primeri pri načrtovanju novih učinkovin	FFA-P4
8.5.2014	15h – 19h	Predstavitve seminarjev	FFA-P4

Lokacija predavalnic:

FFA – P4: Fakulteta za farmacijo, Aškerčeva 7, Ljubljana, predavalnica 4, 3. nadstropje