



סילבוס

הבסיס הכימי לתכנון וגילוי רציונלי של תרופות. - 64200

תאריך עדכון אחרון 13-08-2018

2 HU Credits:

היחידה האקדמית שאחראית על הקורס: רוקחות

השנה הראשונה בתואר בה ניתן ללמוד את הקורס: 0

סמסטר: סמסטר א'

שפת ההוראה: עברית

קמפוס: הר הצופים

מורה אחראי על הקורס (רכז): עמירם גולדבלום

דוא"ל של המורה האחראי על הקורס: amiramg@ekmd.huji.ac.il

שעות קבלה של רכז הקורס: בדוא"ל

מורי הקורס:

פרופ עמירם גולדבלום

תאור כללי של הקורס:

בקורס יוצגו הבסיס הכימי והביולוגי של פעילות תרופות והגישות העיקריות לגילוי ותכנון תרופות

באופן שמבוסס על הבנת המבנה והתכונות של המולקולות של התרופות ופגיעתן במטרות הביולוגיות כדי לתקן מצבי מחלה. נתמקד בבסיס הכימי של מבנה מולקולות תרופתיות, שכולל קישור בין אטומים שונים והמשמעות של הקישור ביחס לתכונות המולקולות ויכולתן לחדור לגוף ולהשפיע.

מטרות הקורס:

הכרה מעמיקה עם מושגי יסוד של ה"כימיה התרופתית" במיוחד עם מבנה תרופות שמבוסס על הבנה כימית של קישור בין אטומים ומולקולות ומשמעויותיו ביחס לתכונות המולקולות והשפעתן תרופות על מערכות ביולוגיות.

תוצרי למידה

בסיומו של קורס זה, סטודנטים יהיו מסוגלים:

יכולת להבין מאמרים ודיווחים על תרופות בעיתונות מדעית פופולארית

דרישות נוכחות (%) :

שיטת ההוראה בקורס: פרונטלית

רשימת נושאים / תכנית הלימודים בקורס:

תיכנון וגילוי רציונאלי שת תרופות □ 64200

קורס בתוכנית אבני פינה 2017-2018

גולדבלום עמירם 'פרופ: הקורס מרצה amiramg@ekmd.huji.ac.il

2 שעות שבועיות-סמסטר

ב'. 2 נקודות זכות.

סילבוס omriwolk@gmail.com

א. מבוא לקורס: שיעור 1-2

□ מבוא כללי לתרופות, מרשמים, בעבר וכיום.

□ מהו תכנון וגילוי רציונאלי, תרופות רציונאליות.

□ שלבי פיתוח וגילוי תרופות בימינו, קשיים ואתגרים שבחיפוש ופיתוח.

□ חיפוש תרופות ממוחשב ותוצאותיו

□ שיטות לקבלת מידע □ קריסטלוגרפיה, ספריות ממוחשבות וסריקה שלהן.

□ מקורות לתרופות, רפואה צמחית ותרופות "סבתא".

□ תרופות בימינו, הדור החדש, הגישה המדעית.

□ פרמקולוגיה- פרמקודינאמיקה ופרמקוקינטיקה

□ הומאופתיה מול מקורות צמחיים.

□ התנגשויות בין תרופות, וסמים. FDA- □ אישור תרופות של ימינו ו

□

ב. מבוא כימי וביולוגי: שיעורים 3-5

□ מסלולי תרופה בגוף: מטרות התרופות בגוף, מערכות כניסה, הובלה ופינוי.

□ התא: ממבראנת התא, שומנים ורצפטורים.

□ קישור תרופה לרצפטור: מנעול מפתח, יחסי גודל בין תרופה למטרה.

□ אטום: טבלת היסודות. מבנה, מושגי יסוד, אלקטרונים פרוטונים ונויטרונים.

□ אלקטרוני ערכיות, מסה אטומית, גודל, מטען.

□ אנרגיות: יחידות מידה, אנרגיה קינטית, אנרגיה פוטנציאלית וקינטית

□ קשרים בין אטומים: קשר יוני, אלקטרו-שליליות ואלקטרו חיוביות של אטום, קשר

קוולנטי-חיבור אלקטרוני ערכיות. משקל מולקולרי, כלל השמינייה

□ קשר קוולנטי, פולרי, יוני

□ מבנה מרחבי של מולקולות

ג. המים: שיעורים 6-7

□ המים כמולקולת החיים.

□ מבנה מולקולת המים, דיפול במולקולה, קוטב, חלוקת מטען בין האטומים.

□ קשרי מימן: משיכה ודחייה בין מטענים נגדיים, סידור מרחבי מסודר ומצבי צבירה שונים של המים בתלות בקשרי המימן.

□ משמעות של קשרי המימן לחיים. המסה במים. מאפיינים והגדרות של הממס

והמומס. התכונות: הידרופוביות הידרופיליות.

ד. חומצות ובסיסים וקבוצות מאפיינות: שיעורים 7-8

ה. ובסיסים חומצות של מאפייניהם. ובסיס חומצה בתהליכי הפרוטון תפקיד □ pH.

חומציות ובסיסיות של קבוצות כימיות שונות.

□ קבוצות כימיות מאפיינות חשובות: אמין, קרבוקסיל, הידרוקסיד, חומצה, טבעת ארומטית, וכו'.

□ קלסיפיקציה של מולקולות על פי תכונות כגון: גודל, מבנה תלת מימדי, אורך, מטען,

הרכב יסודות אופייני וכו'. דוגמאות למולקולות ידועות.

ה. כימואינפורמטיקה ושיטות חישוביות: שיעורים 9-10

□ כימואינפורמטיקה: איסוף מידע על מולקולות, הפיכה של מבנים לנתונים מספריים.

שימוש במחשב לבניית תיאוריה או מודל. תכונות אותן ניתן לכמת. בניית גרף של

תלות בין מאפיין לתכונה ביולוגית או לבין פעילות.

□ משואת קשר בין מבנה ותכונות לבין פעילות. משתנה תלוי ומתשנה בלתי תלוי.

דוגמאות לבניית קשר כמותי בין תכונות לפעילות.

□ פארמקוקינטיקה וכלל החמש של ליפנסקי לזמינות ביולוגית אוראלית: חשיבות הכללים ומטרתם.

□ אבחנה בין מולקולות באמצעות טביעות אצבעות של מולקולות: סוגים (חד, דו ותלת-

מימדיים) וצורת השימוש בהם בעת מחקר וחישובים של תכונות

□ דמיון ושוני ביו מולקולות □ קשר בין דמיון לפעילות

ב שימוש □ קבוצות בין אבחנה של שונות רמות □ קלסיפיקציה □ MCC

ו. חלבונים ודנ"א: שיעורים 11-12

□ דנ"א: מהו דנ"א, מבנה. נוקליאוטידים, סליל כפול, דחיסה של החומר התורשתי

בתא, צופן גנטי. הקוד הגנטי, צורת קידוד של חלבונים.

□ חלבונים: מבנה, חומצות אמינו, קידוד על ידי דנ"א, מבנה ראשוני, שניוני, שלישוני

ורבעוני. קיפול. תלות הפעילות במבנה. קריסטלוגרפיה ופענוח מבנה בעזרת רנטגן.

מבנה המבוסס תרופות תכנון □ .SBDD

ז. עיגון כשיטה רציונאלית לחיפוש תרופות: שיעורים 13-14

□ אנרגיה בין מולקולות: אנרגיה בין קבוצות טעונות, קבוצות מאפיינות ואינטראקציות

שהן יוצרות: מוסר ומקבל קשרי מימן, קבוצה ארומטית וקבוצה הידרופובית.
קבוצות טעונות: אמינים וחומצות. אנרגיה כבסיס לתהליך העיגון.
□ האפקט ההידרופובי: משמעות וצפי להתנהגות של חומרים, האנתלפיה והאנטרופיה
כמניעים להתרחשות של תגובות כימיות, ותגובת העיגון בפרט.

חומר חובה לקריאה:

אין חומר חובה - יש רשימה של חומרי רשות

חומר לקריאה נוספת:

מרכיבי הציון הסופי :

מידע נוסף / הערות: